



## RESUMEN

El presente proyecto contempla el estudio micromecánico de los ensayos de micro y nano-indentación realizados sobre capas metálicas delgadas para aplicaciones de micro y opto-electrónica. En particular, en el proyecto se realizan simulaciones por elementos finitos de un proceso de nano-indentación piramidal sobre una capa delgada de cobre. El aspecto más novedoso del trabajo es que desconocemos la existencia de cualquier otro estudio similar en el que se considere la verdadera anisotropía de la deformación elastoplástica del recubrimiento, caracterizada por el movimiento de dislocaciones en planos de deslizamiento preferentes, sobre la respuesta al contacto. De esta manera, el presente proyecto extiende el conocimiento existente en la comunidad científica respecto a la influencia del sustrato en la deformación por indentación de un recubrimiento metálico delgado. La comparación de resultados obtenidos mediante simulaciones de los ensayos de indentación en un monocristal con idéntica orientación que la del recubrimiento, permite dilucidar los aspectos micromecánicos de dicha influencia.





## SUMARIO

RESUMEN .....	2
SUMARIO .....	4
1. INTRODUCCIÓN .....	6
1.1. Objetivo .....	6
1.2. Alcance del proyecto .....	6
2. TEORÍAS .....	7
2.1. Fundamentos teóricos de indentación .....	7
2.1.1. Introducción .....	7
2.1.2. Dureza y Curva P-h <sub>s</sub> .....	7
2.2. Modelización por elementos finitos .....	10
2.2.1. Principio .....	10
2.2.2. Estrategia de modelización .....	11
2.3. Propiedades de los materiales .....	12
2.3.1. Modelo de elasticidad anisotrópica .....	12
2.3.2. Modelo de plasticidad cristalina .....	15
2.3.3. Teoría de plasticidad cristallina de Asaro and Rice .....	41
3. HERRAMIENTAS INFORMATICAS .....	74
3.1. Introducción a ABAQUS .....	74
4. MODELIZACION DEL ENSAYO DE MICRO-INDENTACION .....	76
4.1. Creación de la malla .....	76
4.1.1. Introducción .....	76
4.1.2. Modificaciones introducidas a la nueva malla .....	76
4.1.3. Historial de la creación .....	80
4.2. Definición de los recubrimientos y de los substratos .....	83
4.2.1. Los “element sets” .....	83
4.2.2. Utilización de los modelos de materiales .....	83
4.2.3. Definición de los recubrimientos .....	84
4.3. Definición del contacto .....	85
4.4. Carga y condiciones de contorno .....	86
5. VARIABLES CALCULADAS .....	87
6. UNIDADES DE MEDIDAS .....	88
7. PROBLEMAS DE COMPUTACION .....	89
7.1. Problemas de capacidad de ordenadores .....	89
7.2. Problemas con ABAQUS .....	89
8. RESULTADOS .....	91
8.1. Resultados de campos .....	91
8.1.1. Campo de deformación de cortadura total sobre todos los sistemas de deslizamiento .....	91
8.1.2. Campo de densidad de dislocaciones .....	93



8.2.	Deformaciones incoherentes .....	96
8.3.	Variables históricas.....	98
8.3.1.	Curvas P-h .....	98
8.3.2.	Estudio de los parámetros H, $\alpha$ y K.....	99
9.	CONCLUSIONES .....	103
10.	BIBLIOGRAFÍA .....	104
11.	BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA .....	106



# 1. INTRODUCCIÓN

## 1.1. Objetivo

El objetivo de este proyecto es estudiar el comportamiento micromecánico de los recubrimientos metálicos delgados sometidos a ensayos de micro y nano-indentación. Las técnicas de micro y nano-indentación ya han permitido mejorar el conocimiento del comportamiento de los materiales pero aún, ningún estudio se ha interesado por el caso de los recubrimientos metálicos tan utilizados en los campos de la micro-electrónica y los semiconductores, la óptica y opto-electrónica, la resistencia a la corrosión.

Así este estudio debe permitir extender el conocimiento científico del comportamiento de los materiales en campos tecnológicos avanzados.

## 1.2. Alcance del proyecto

Este proyecto tiene un alcance muy amplio porque se refiere a varios campos científicos tan vastos y específicos como las matemáticas, la mecánica, las ciencias de los materiales y la informática.

En efecto, en este estudio, necesitaremos utilizar conocimientos de mecánica y de simulación por elementos finitos para explicar los resultados de los ensayos. Nos serviremos de las ciencias de los materiales para definir los modelos constitutivos de los materiales (especialmente el modelo de plasticidad cristalina) con el que realizaremos los ensayos de indentación.

Por fin, todo este estudio será efectuado por ordenadores con un programa (ABAQUS) que utiliza un lenguaje informático (Python) que se debe aprender para poder utilizarlo.



## 2. TEORÍAS

En este primer capítulo, presentaremos las teorías y conocimientos necesarios a la comprensión del proyecto.

Después de haber recordado los fundamentos teóricos de indentación y los principios de la modelización por elementos finitos, explicaremos detalladamente las teorías de los modelos de materiales utilizados

### 2.1. Fundamentos teóricos de indentación

#### 2.1.1. Introducción

La resistencia y la dureza son medias de la resistencia a la deformación plástica, la cual es una deformación permanente.

Más concretamente la dureza se puede definir como la resistencia de un material a la deformación plástica localizada. A lo largo de los años se han desarrollado técnicas cuantitativas de dureza que se basan en un pequeño indentador que es forzado sobre una superficie del material a ensayar en condiciones controladas de carga y velocidad de aplicación de la carga. En estos ensayos se mide la profundidad o tamaño de la huella resultante, lo cual se relaciona con un número de dureza, cuanto más blando es el material, mayor y más profunda es la huella, y menor es el número de dureza.

Existen varias maneras de medir la dureza de un material, y una gran variedad de indentadores (Vickers, Brinell, Rockwell,..) que permiten estudiar tanto el comportamiento elástico como la repuesta plástica. En nuestro caso, utilizaremos un indentador de Berkovitch.

#### 2.1.2. Dureza y Curva P-h<sub>s</sub>

El valor de la dureza se puede deducir empleando la formula siguiente

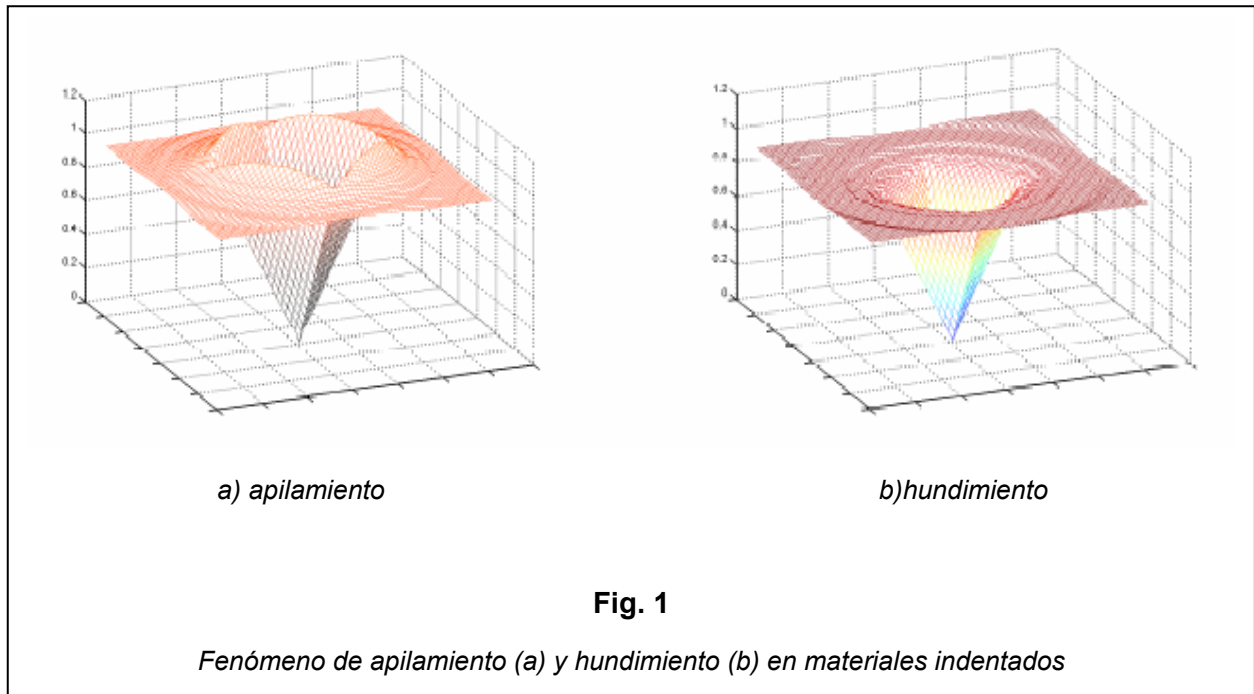
$$H = \frac{P_{\max}}{A} \quad (\text{Ec. 2.1})$$

donde  $P_{\max}$  y  $A$  son respectivamente el valor máximo de la carga aplicada por el indentador sobre el material y la área real de la huella proyectada en el plano normal a la dirección de indentación.



Además, tenemos que introducir un parámetro que tiene en cuenta si el material apila sobre el indentador o si hunde debajo de él.

$$\alpha = \frac{A}{A_s} \quad (\text{Ec. 2.2})$$



donde  $A_s$  es el área de contacto teórico (que no toma en cuenta los fenómenos de apilamiento/hundimiento).  $A_s$  está directamente relacionado a  $h_s$  la profundidad de penetración teórica

$$A_s = f h_s^2 \quad (\text{Ec. 2.3})$$

Donde  $f$  es un coeficiente de proporcionalidad. Por los indentadores de Berkovitch,

$$f = 24.56$$

De esta manera, obtenemos,

$$A = \alpha f h_s^2 \quad (\text{Ec. 2.4})$$

y

$$P = H \alpha f h_s^2 \quad (\text{Ec. 2.5})$$





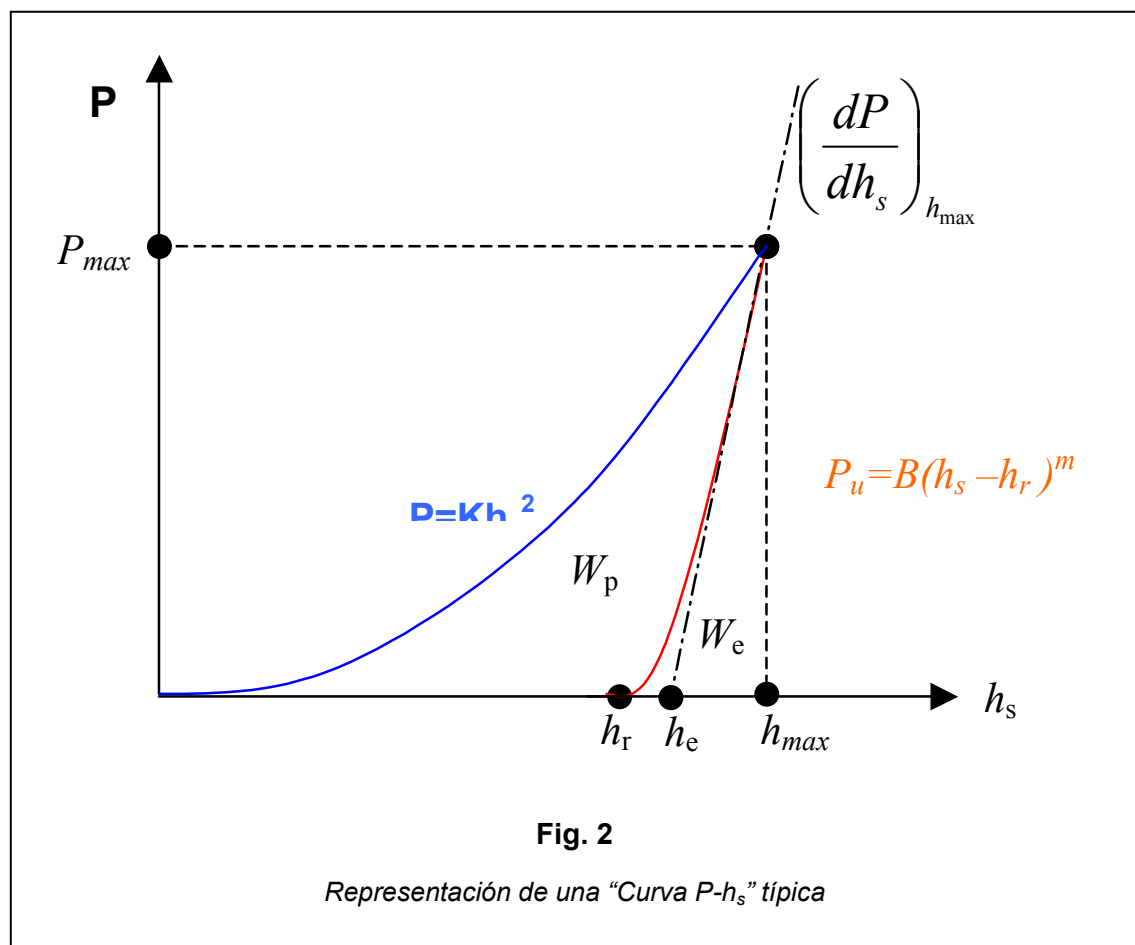
Si ponemos  $K = H_0 f$ , al final obtenemos

$$P = K h_s^2 \quad (\text{Ec. 2.6})$$

Esta fórmula es la ecuación de la “curva P- $h_s$ ” que da la evolución de  $P$  en función de  $h_s$  durante la carga del material. La ecuación de la descarga es más complicada se escribe

$$P_u = B(h_s - h_r)^m \quad (\text{Ec. 2.7})$$

Donde  $B$  y  $m$  dependen del material y de la forma del indentador y  $h_r$  es la profundidad de la deformación que queda después de la indentación.



Podemos notificar que la deformación es plástica porque  $h_r \neq 0$ , este significa que al fin del ensayo, queda una deformación residual en el material



## 2.2. Modelización por elementos finitos

### 2.2.1. Principio

El principio básico de los métodos de modelización por elementos finitos es la creación de un modelo digital constituido por un número finito de elementos. Denominada Análisis por Elementos Finitos (FEA) este método permite resolver problemas mecánicos complejos utilizando la potencia de los ordenadores. Su popularidad se debe a su ventaja principal: sustituir a los prototipos costosos y la posibilidad de simular de forma rutinaria las mismas condiciones de servicio o de ensayo variando de manera sencilla los parámetros de diseño y del material.

En nuestro caso, la FEA será utilizada para estudiar el comportamiento de materiales sometidos a ensayos de micro y nanoindentación. Eso permite estudiar cualquier tipo de material simplemente dando sus propiedades y sin realizar varias pruebas o aproximaciones estadísticas.

El análisis FEA más común es el de elasticidad lineal. Se asume que toda la estructura se comporta de manera elástica, que las tensiones son linealmente proporcionales a las deformaciones, y que la aplicación de las cargas no modifica la forma del sólido. Suele ser una buena aproximación del comportamiento real de las estructuras.

Pero, en algunos casos, estas simulaciones no reflejan la realidad de manera exacta. Cuando eso ocurre, el problema se vuelve no-lineal. Eso puede ser debido a ciertas propiedades del material estudiado, o a las condiciones de contorno aplicadas....De manera general, una FEA no-lineal es más costosa en cuanto al tiempo de cálculo.

Existen tres tipos de no-linealidades:

- Geométricas debidas a la existencia de grandes deformaciones.
- De contacto debidas a la existencia en el modelo de superficies que entran en contacto con o sin desplazamientos relativos entre ellas
- Del material, debidas al comportamiento mecánico de materiales que se apartan de la proporcionalidad entre tensiones y deformaciones.

En el problema de indentación coexisten los tres tipos de no-linealidades por lo cual el coste computacional de las simulaciones crece considerablemente



### **2.2.2. Estrategia de modelización**

Un proyecto de modelización por elementos finitos suele ser un trabajo laborioso. Para que sea eficiente, es necesario establecer una estrategia adecuada en función del problema. Esta estrategia se puede dividir en varias etapas:

#### **Primera etapa: Análisis del problema**

Esta primera etapa es fundamental. Se trata de establecer las bases del proyecto. Debemos saber que queremos analizar, y cuales son las soluciones que esperamos. Eso implica conocer el problema, las condiciones de contorno, si el modelo estará sujeto a vibraciones, a cambios de temperatura... Se debe conocer también las propiedades del material utilizado, si el análisis va a ser lineal o no-lineal, cuales son los criterios de ruptura...

Preparando esta etapa de manera apropiada, se podrá simplificar el modelo eliminando parámetros con poca de influencia o utilizando propiedades de simetría si el caso lo permite....

#### **Segunda etapa: Realización del modelo de Dibujo Ayudado por Computador (CAD)**

Una vez las bases del trabajo están claramente establecidas, se necesita diseñar la forma del modelo que va a ser estudiado, aplicando el mayor número de simplificaciones posibles de la geometría para reducir el tamaño del modelo (en nuestro caso, ninguna reducción geométrica es posible porque tenemos en cuenta la anisotropía de los materiales). La forma final se denomina modelo CAD. El modelo CAD puede ser de 1, 2 o 3 Dimensiones. En nuestro caso, el modelo CAD tendrá que representar, lo más fielmente posible un recubrimiento delgado de cobre puesto sobre un sustrato de silicio.

#### **Tercera etapa: Elaboración de la malla, aplicación de cargas y condiciones de contorno:**

Después de haber determinado el tipo de análisis requerido, las características principales del problema, y haber diseñado el modelo CAD, se debe crear la malla. Hay que tener en cuenta que cuanto más complejo es el CAD, más compleja será la malla.

La malla final consiste en nodos conectados entre ellos formando elementos. Son puntos a partir de los cuales se calculará el comportamiento del modelo en respuesta a las cargas aplicadas. Esta respuesta se define en término de Grados De Libertad (DOF: Degrees Of Freedom). Es un parámetro esencial en cuanto a la optimización de



la malla. Varias pruebas son necesarias para obtener la malla óptima. Una vez obtenido la malla modela, se aplican las cargas y las condiciones de contorno.

### **Etapas finales: análisis de los resultados**

La última etapa consiste en recuperar los resultados, analizarlos y comprobarlos.

El presente informe se basará sobre esta estrategia y contestará a las preguntas siguientes:

¿Que queremos hacer, y por qué?

¿Que vamos a estudiar con nuestro modelo?

¿Como modelizar nuestro problema?

¿Cuales son los modelos constitutivos apropiados para nuestro material y nivel de estudio?

¿qué herramientas y estrategias se deben utilizar?

## **2.3. Propiedades de los materiales**

En este estudio utilizaremos dos tipos de modelos de materiales muy diferentes.

-Un modelo de elasticidad anisótropa

-Un modelo de plasticidad cristalina

Explicaremos la necesidad de utilizar estos dos modelos en la próxima parte del proyecto, pero en primer lugar, expliquemos la teoría de estos dos modelos

### **2.3.1. Modelo de elasticidad anisotrópica**

La elasticidad anisotrópica es una forma de elasticidad lineal que es una de las formas más simples de elasticidad. La validez de estos modelos implica que las deformaciones deban de ser pequeñas.

En función del número de planos de simetría, un material se puede clasificar como isotrópico (un infinito de planos de simetrías pasan por cada punto) o anisotrópico (ningún plano de simetría) . Elegiremos el último caso para que nuestro estudio sea lo más general posible, sin tener en cuenta de los planos de simetría que pueden existir.

#### **2.3.1.1. Teoría de la Elasticidad Lineal**



Un caso particular de sólido elástico se presenta cuando las tensiones y las deformaciones están relacionadas linealmente, es decir:

$$\sigma_{ij} = \sum_{k,l} C_{ijkl} \varepsilon_{kl} \quad (\text{Ec. 2.8})$$

donde  $\sigma_{ij}$  son los componentes de la tensión,  $C_{ijkl}$  son los componentes del tensor de elasticidad, y  $\varepsilon_{kl}$  son los componentes del tensor de deformación elástica

Cuando eso sucede decimos que tenemos un sólido elástico lineal. La teoría de la elasticidad lineal es el estudio de sólidos elásticos lineales sometidos a pequeñas deformaciones de tal manera que además los desplazamientos y deformaciones sean "lineales" (es decir, que las componentes del campo de desplazamientos  $u$  sean aproximadamente una combinación lineal de las componentes del tensor de deformación del sólido. En general un sólido elástico lineal sometido a grandes desplazamientos no cumplirá esta condición. Por tanto la teoría de la elasticidad lineal sólo es aplicable a:

**Sólidos elásticos lineales**, en los que tensiones y deformaciones estén relacionadas linealmente (linealidad material).

**Deformaciones pequeñas**, en ese caso puede deformaciones y desplazamientos estén relacionados linealmente. En ese caso puede usarse el tensor de deformación lineal de Green-Lagrange para representar el estado de deformación de un sólido (linealidad geométrica).

### 2.3.1.2. Tensión

La tensión en un punto se define como la fuerza aplicada sobre un plano  $\pi$  que contenga al punto dividida por el área de la región, es decir, la tensión es la fuerza por unidad de superficie y depende del punto elegido, de la orientación del plano. Puede probarse que la normal al plano escogido  $n_\pi$  y la tensión  $t_\pi$  en un punto están relacionadas por:

$$t_\pi = \mathbf{T}(n_\pi)$$

Donde  $T$  es el llamado tensor tensión que fijada una base vectorial ortogonal viene representado por una matriz simétrica 3x3:

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_x & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{yx} & \sigma_y & \tau_{yz} \\ \tau_{zx} & \tau_{zy} & \sigma_z \end{pmatrix}$$



Dada una región en forma de octaedro con caras paralelas a los ejes coordenados situado en el interior un sólido elástico tensionado, las componentes  $\sigma_{xx}$ ,  $\sigma_{yy}$  y  $\sigma_{zz}$  dan cuenta de cambios de longitud en las tres direcciones, pero que no distorsionan los ángulos del octaedro, mientras que las componentes  $\sigma_{xy}$ ,  $\sigma_{yz}$  y  $\sigma_{zx}$  están relacionadas con la distorsión angular que convertiría el ortoedro en un paralelepípedo.

Cuando las deformaciones no cambian con el tiempo, el campo de tensiones dado por el tensor tensión representa un estado de equilibrio con las fuerzas de volumen  $b = (b_x, b_y, b_z)$  en todo punto del sólido, lo cual implica que el campo de tensiones satisface estas condiciones de equilibrio:

$$\begin{aligned}\frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{xz}}{\partial z} &= b_x \\ \frac{\partial \sigma_{yx}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{yz}}{\partial z} &= b_y \\ \frac{\partial \sigma_{zx}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{zy}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{zz}}{\partial z} &= b_z\end{aligned}$$

#### 2.3.1.3. Deformación

En teoría lineal de la elasticidad, la pequeñez de las deformaciones es una condición necesaria para poder asegurar que existe una relación lineal entre los desplazamientos y la deformación. Bajo esas condiciones, la deformación puede representarse adecuadamente mediante el tensor deformación infinitesimal que viene dado por:

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} & \varepsilon_{13} \\ \varepsilon_{21} & \varepsilon_{22} & \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{31} & \varepsilon_{32} & \varepsilon_{33} \end{pmatrix}$$

Donde las componentes están linealmente relacionadas con los desplazamientos mediante esta relación:

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (\text{Ec. 2.9})$$

#### 2.3.1.4. Ecuaciones de Lamé-Hooke

Las ecuaciones de Lamé-Hooke son las ecuaciones constitutivas de un sólido elástico lineal y tienen la forma:



$$\sigma_{ij} = \sum_{k,l} C_{ijkl} \epsilon_{kl}$$

En el caso de un problema unidimensional,  $\sigma = \sigma_{11}$ ,  $\epsilon = \epsilon_{11}$ ,  $C_{11} = E$  y la ecuación anterior se reduce a:

$$\sigma = E\epsilon \quad (\text{Ec. 2.10})$$

donde E es el modulo de Young

### 2.3.1.5. Estabilidad de un material elástico lineal

Los materiales elásticos linealmente deben de satisfacer las condiciones de estabilidad de Drucker. Estas condiciones requieren que el tensor C sea definido positivo, lo que conduce a algunas restricciones sobre los valores de las constantes elásticas. Pero estas restricciones impuestas sobre las constantes elásticas con respecto a los requisitos de estabilidad son demasiado complejas para ser expresadas en termos de ecuaciones simples. Sin embargo, el requisito según el cual C debe de ser definido positivo requiere que todas las valores propias de la matriz [C] sean positivas

### 2.3.2. Modelo de plasticidad cristalina

Vamos ahora a presentar este otro tipo de modelo de comportamiento del material. Este modelo será mucho más detallado que el precedente porque es uno de los puntos los más importantes del estudio. Origen de la plasticidad

#### 2.3.2.1.1 Las dislocaciones

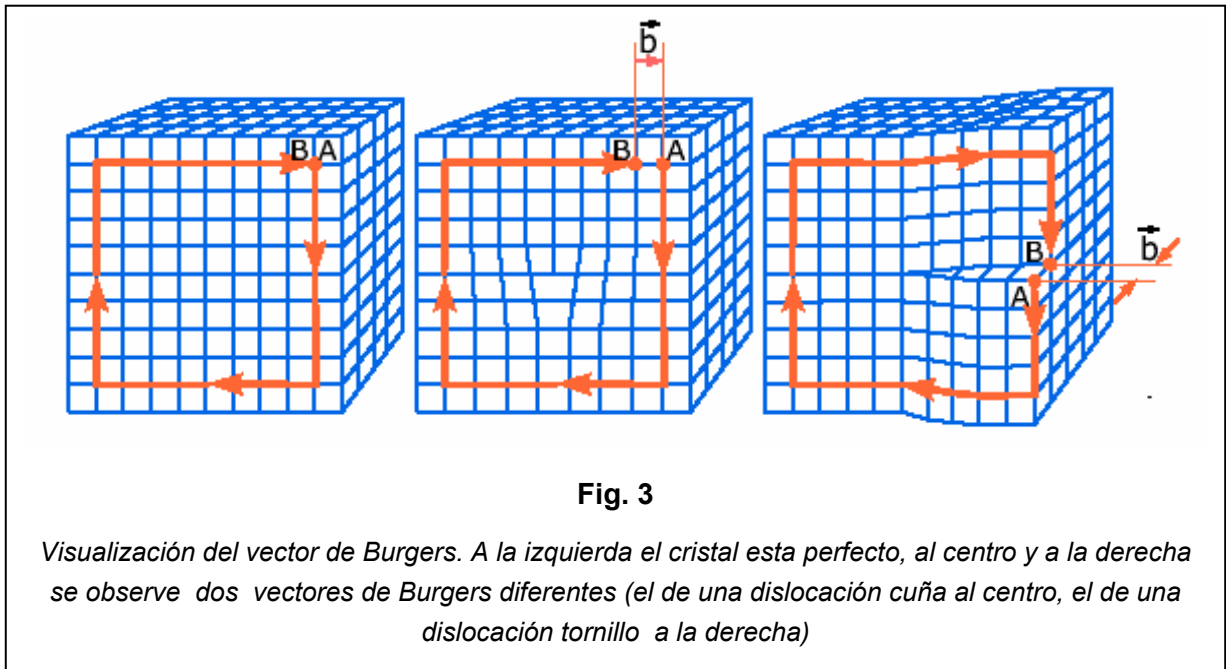
Las dislocaciones son el mecanismo fundamental de deformación plástica en la mayoría de metales. Ya se han previsto en los medios continuos por el matemático Volterra (1907) y observadas en los cristales líquidos a principios del siglo XX por Friedel.

Las dislocaciones son defectos de apilamiento atómico de los cuales los mecanismos asociados son responsables de una gran parte de las propiedades plásticas de los metales. Después de la presentación del concepto de dislocación y la relación con la deformación plástica, presentaremos los mecanismos físicos inducidos.

Los dos parámetros importantes de una dislocación son el paso de desplazamiento que se llama el vector de Burgers y la línea de dislocación.



Para caracterizar el vector de Burgers de una dislocación, se conduce a observar la diferencia que existe entre un trazado cerrado en una porción de cristal perfecto y el mismo trazado en la misma porción del cristal que contiene una dislocación (Fig. 3)



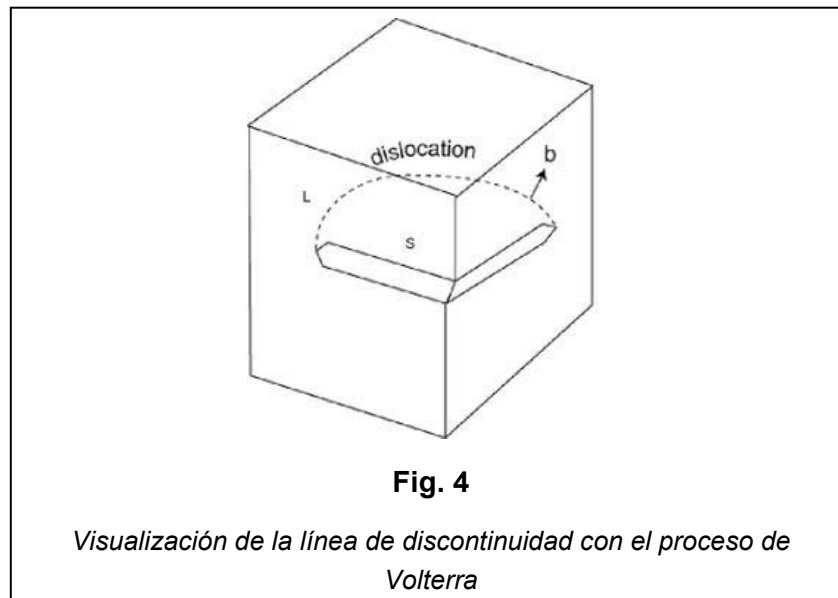
El vector de Burgers  $\vec{b}$  traduce el desplazamiento a lo largo de un circuito cerrado  $c$  en torno a la línea de discontinuidad de vector director  $d\vec{u}$ .

$$\vec{b} = \oint_c d\vec{u}$$

Para caracterizar la línea de dislocación, es interesante estudiar su construcción por el proceso de Volterra. Consideremos para eso un sólido homogéneo que recortamos según cualquiera superficie. Entonces se crean dos labios de corte. Se pueden desplazar estos dos labios la una con respecto al otro de una cantidad igual al vector de Burgers, añadiendo o retirando materia si necesario. Al volver a pegar los dos labios, se obtiene de nuevo un sólido homogéneo, pero esta vez, se creó una línea de singularidad elástica llamada línea de dislocación. Esta línea es orientada por un vector  $\vec{u}$  tangente a su trayectoria (esto permite tomar un convenio para elegir el vector de Burgers).



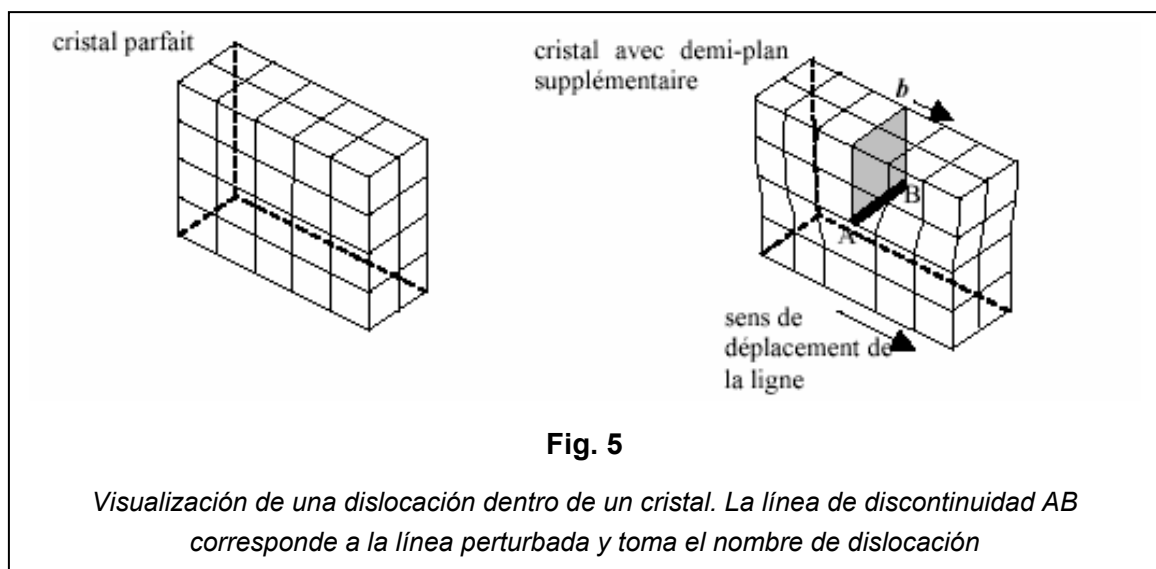




#### 2.3.2.1.2 Dislocación cuña/ dislocación tornillo

##### Dislocación cuña

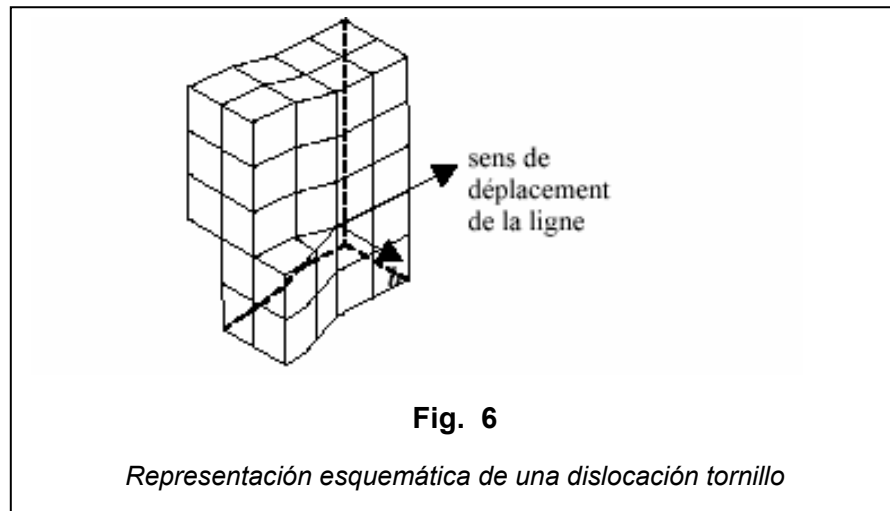
La dislocación cuña corresponde a la línea atómica de la estructura cristalina perturbada por un medio plano de átomos suplementaria en la red. En una dislocación cuña, el vector de Burgers esta ortogonal a la línea de discontinuidad y colineal al desplazamiento.



##### Dislocación tornillo

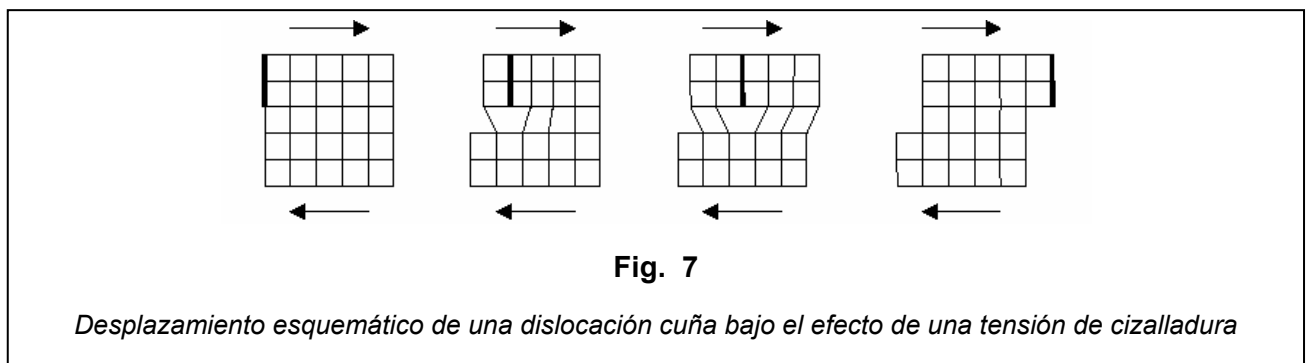


En el caso de una dislocación tornillo, el vector de Burgers esta colineal a la línea de discontinuidad de la dislocación y colineal al desplazamiento



#### 2.3.2.1.3 Desplazamiento de las dislocaciones y sistemas de deslizamiento

A temperatura ambiente las dislocaciones son principalmente responsables de las propiedades plásticas de los metales. El mecanismo principal es el deslizamiento de la dislocación en un plano que contiene el vector de Burgers **b**. bajo una tensión de cizalladura, la línea atómica delimitando el medio plano suplementario se solidariza con la del medio plano superior vecino..



Cuando una dislocación cruza todo el cristal , deja una marcha residual de longitud igual a la de la norma del vector **b**, correspondiendo a una deformación plástica permanente.

Estudios cristalográficos revelaron que los planes de deslizamiento, en los cuales las dislocaciones pueden desplazarse, fueran los planes donde la densidad atómica es la mas grande, llamados "planos densos" del apilamiento cristalográfico. Cada plano es caracterizado por su vector normal. Se utiliza a menudo el normal unitario **n** para caracterizarlo.

De la misma forma, la dirección de deslizamiento es una dirección densa del plano denso correspondiente. La combinación plan de deslizamiento, dirección de



deslizamiento define esto que se llama un sistema de deslizamiento. En razón de las simetrías de las estructuras metálicas, existen varios sistemas de deslizamiento potenciales al interior de una estructura dada. Un sistema de  $(\mathbf{s}^{(s)}, \mathbf{n}^{(s)})$  caracterizado por  $\mathbf{s}^{(s)}$  el vector unitario colineal al vector de Burgers correspondiente, y  $\mathbf{n}^{(s)}$  el vector normal unitario al plano de deslizamiento. El exponente (s) define el número o el nombre del sistema que corresponde según los convenios elegidos. Cuando una dislocación se desplaza en un sistema de deslizamiento se dice que éste es "activo".

#### 2.3.2.1.4 Activación de los sistemas de deslizamiento

El sistema de deslizamiento  $(\mathbf{s}, \mathbf{n})$  se activa si la tensión de escisión resuelta del primer sistema de deslizamiento  $p$  alcanza un valor crítico  $\tau_c^p$ . Llamando  $\phi$  el ángulo entre la dirección de la fuerza de tracción aplicada  $\mathbf{T}$  y normal  $\mathbf{n}$  al plan de deslizamiento, y  $\lambda$  el ángulo entre la dirección de la fuerza de tracción aplicada y la dirección de deslizamiento  $\mathbf{s}$  en este plano, la componente  $\mathbf{T}'$  de  $\mathbf{T}$  sobre la dirección de deslizamiento  $\mathbf{s}$  es tal que  $\mathbf{T}' = \mathbf{T} \cdot \cos \lambda$

Además este componente de fuerza se aplica sobre una superficie  $S' = \frac{S}{\cos \phi}$

La escisión resuelta de este sistema de deslizamiento  $\tau^p = \frac{F'}{S'}$  pues vale con las relaciones anteriores:

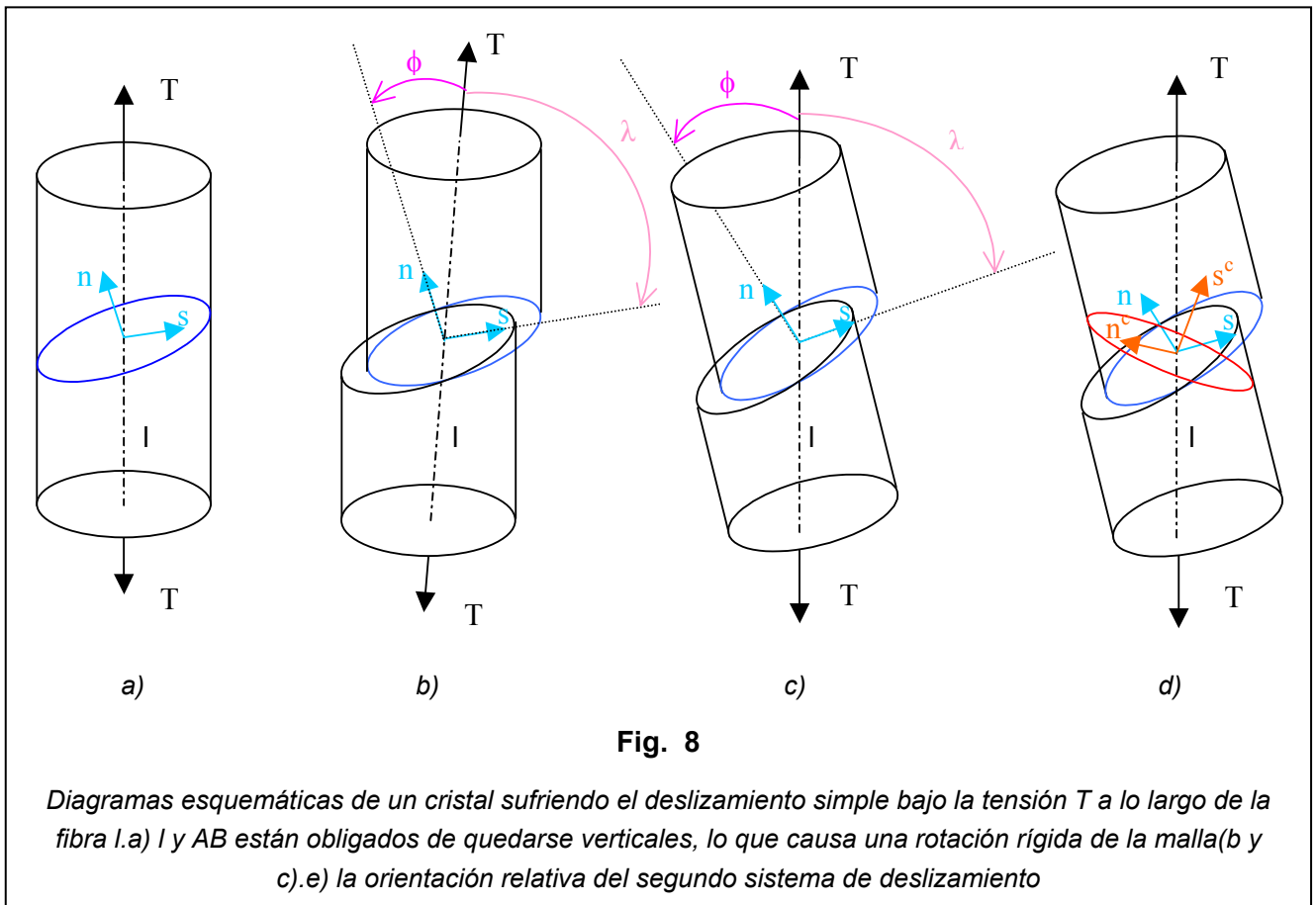
$$\tau^p = \sigma \cdot \cos \lambda \cdot \cos \phi = \sigma \cdot m_s \quad \text{Ec. 2.11)}$$

$m_s$  se llaman el factor de Schmid y la escisión crítica  $\tau_c$  por consiguiente es dado por:

$$\tau_c^p = \sigma_t \cdot m_s \quad \text{(Ec. 2.12)}$$

con  $\sigma_t$  el límite elástico en tracción.





Es la ley de Schmid y Boas. El deslizamiento cristalográfico modifica la orientación del cristal. Este fenómeno causa una rotación cristalina: el ángulo  $\phi$  aumenta para traerse la dirección de deslizamiento  $s$  colineal al eje de tracción  $T$ . (si el esfuerzo aplicado era una compresión,  $\phi$  disminuiría para conducir el normal al plano de deslizamiento colineal a  $T$ ). Esta rotación se efectúa hasta que un segundo sistema de deslizamiento se vuelva activo. Comenzará entonces una nueva transformación, luego eventualmente un tercero sistema se volverá activo y una tercera transformación se seguirá

#### 2.3.2.1.5 Densidad de dislocaciones

Explicamos ahora el concepto de densidad de dislocaciones: es la relación de la longitud acumulada de los segmentos de dislocaciones que pertenecen a un mismo sistema en un volumen dado. Este relación se expresa en  $m^{-2}$ .

El movimiento de las dislocaciones está vinculado a los tamaños de tensión y deformación. El primer vínculo histórico fue la ley de Schmid. La ley de Schmid da la condición general de endurecimiento sobre un sistema:

Una dislocación se vuelve móvil si la proyección ortogonal del vector de tensión sobre la dirección de deslizamiento unitaria es igual a un valor límite máximo bautizado  $\tau_{\mu}^{(s)}$ .



Se llama escisión solucionada  $\tau^{(s)}$  para el sistema (s) el valor:

$$\tau^{(s)} = (\sigma \mathbf{n}^{(s)}) \cdot \mathbf{g}^{(s)} \quad (\text{Ec. 2.13})$$

dónde  $\sigma$  es el tensor de las tensiones. La ley de Schmid traduce estos conceptos para determinar si existe un tipo de cizalladura  $\frac{d\gamma^{(s)}}{dt}$  sobre un sistema (s):

si

$$\tau^{(s)} = \tau_{\mu}^{(s)}$$

y

$$\frac{d\tau^{(s)}}{dt} > 0$$

pues

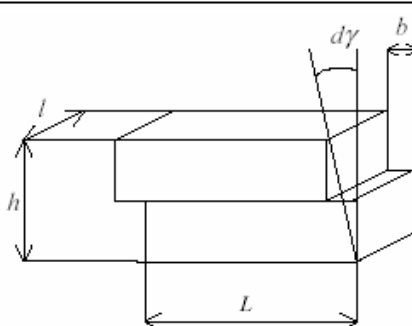
$$\frac{d\gamma^{(s)}}{dt} > 0$$

Esta relación traduce una visión elastoplástica del fenómeno y requiere la determinación del valor del tipo de cizalladura al preliminar.

Un modelo de endurecimiento elastoviscoplastico precisa el criterio de activación y la relación entre la tensión resuelta y la velocidad de deformación  $d\gamma^{(s)}/dt$

#### Relación de Orowan

Se aborda el problema que consiste en pasar del comportamiento individual de una dislocación al comportamiento plástico macroscópico del material. Se considera un paralelepípedo de materia que contiene una dislocación cuña paralela a la anchura  $l$ . Cuando esta dislocación cruza el paralelepípedo y curso la longitud  $dx$ , deja dos marchas de anchuras  $b$  (igual a la norma del vector de Burgers de la ci) opuestas sobre las dos caras perpendiculares al plan de deslizamiento.



**Fig. 9**

*Paralelepípedo cizallado por una dislocación cuña*



La cizalladura obtenido se escribe

$$d\gamma = \frac{b}{h} = \frac{l}{Llh} bL = \rho_m h dx \quad (\text{Ec. 2.14})$$

Este calculo muestra la longitud de la dislocación móvil dividida por el volumen del paralelepípedo, esta fracción esta considerada como la densidad de dislocaciones móviles  $\rho_m$ .

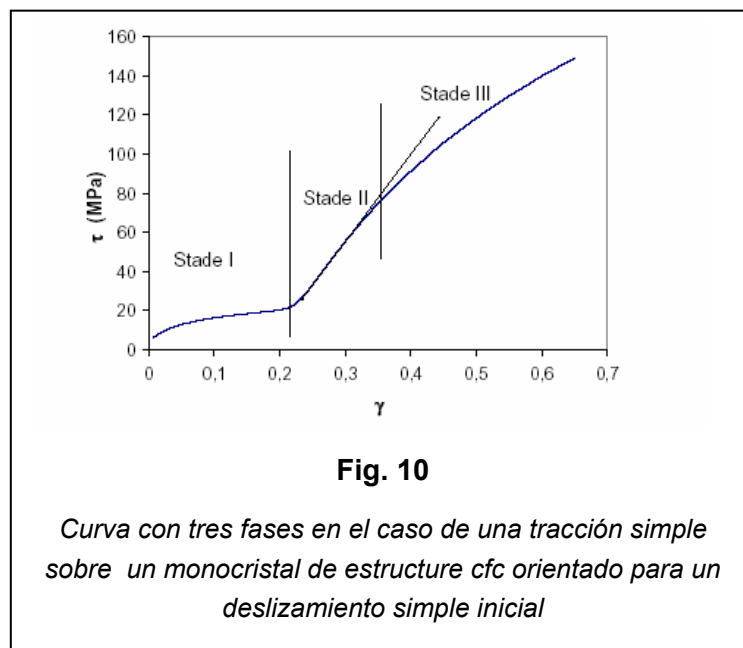
Si se relaciona la cizalladura con el tiempo de desplazamiento, se obtiene:

$$\dot{\gamma} = \rho_m b \bar{v} \quad (\text{Ec. 2.15})$$

donde  $\bar{v}$  representa la velocidad de desplazamiento de la dislocación

#### 2.3.2.1.6 La Curva $\tau = f(\gamma)$

Si activarán tres sistemas de deslizamientos durante la prueba, se observa entonces una curva  $\tau=f(\gamma)$  típico en la que se puede distinguir tres fases que corresponden cada una a la activación de un sistema de deslizamiento suplementario



### Primera Fase

El endurecimiento sobre el sistema el mas solicitado(o sistema primario) se desencadena por una tensión baja. Esta tensión corresponde a la tensión límite máximo que es necesario aplicar a segmentos de dislocación fijados sobre un bosque<sup>1</sup> de dislocaciones. Si las dislocaciones son equidistantes, la dificultad límite máximo vale

$$\tau^{(p)} = \mu b \sqrt{\rho} \quad (\text{Ec. 2.16})$$

La fricción de red es escasa. La producción de dislocaciones móviles se hace conforme al mecanismo de Frank-Read. Se obtiene entonces un aumento del número de dislocaciones almacenadas en el material cuando las dislocaciones móviles se detienen. Una estabilización de la densidad es observable cuando ésta es suficientemente importante para favorecer la aniquilación de las dislocaciones de signos opuestos en planos vecinos, por deslizamiento cruzado. El endurecimiento experimentalmente constatado es escaso en fase I::  $\frac{d\tau}{d\gamma} < 10^{-3} \mu$

### Fase II

La activación de un solo sistema coloca el eje de tracción sobre una posición de simetría cristalina (fig 11). Consecutivamente, un 2nd sistema (sistema secundario) no coplanario al primero se activa. La activación de 2 sistemas en 2 planos diferentes multiplica las intersecciones y los puntos de anclaje. La distancia libre de los segmentos disminuye y el mecanismo de Frank-Read requiere un nivel de dificultad cada vez mas elevado para poder activarse. La multiplicación de las dislocaciones es también más importante y causa cada vez más interacciones, no activables térmicamente<sup>2</sup>. Estas barreras generan el bloqueo de las dislocaciones móviles y penalizan la activación de las fuentes.

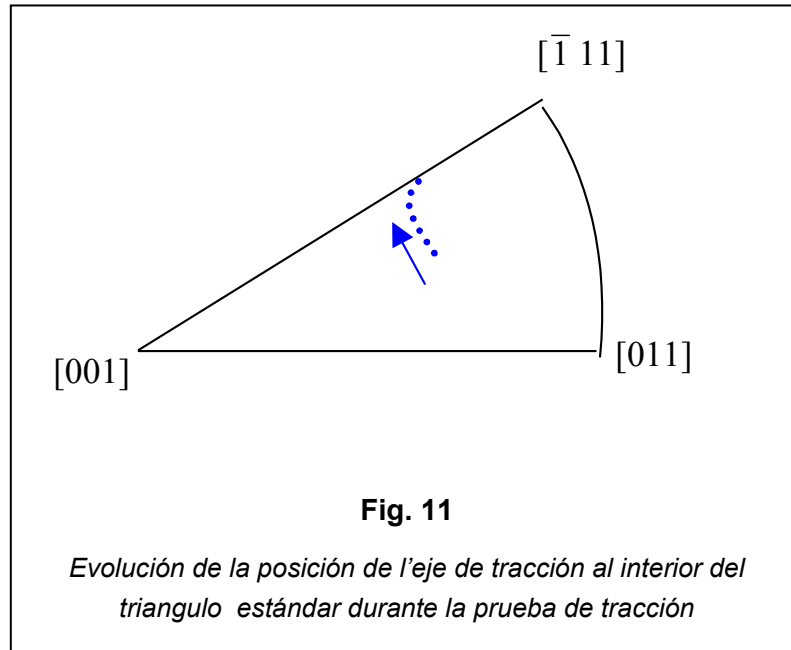
Esta situación implica un endurecimiento importante del orden de  $10^{-2} \mu$ . Las densidades del sistema primario y secundario tienden a convertirse en iguales

---

<sup>1</sup> Ver 3.3.2.3.4

<sup>2</sup> Ver 3.3.2.4





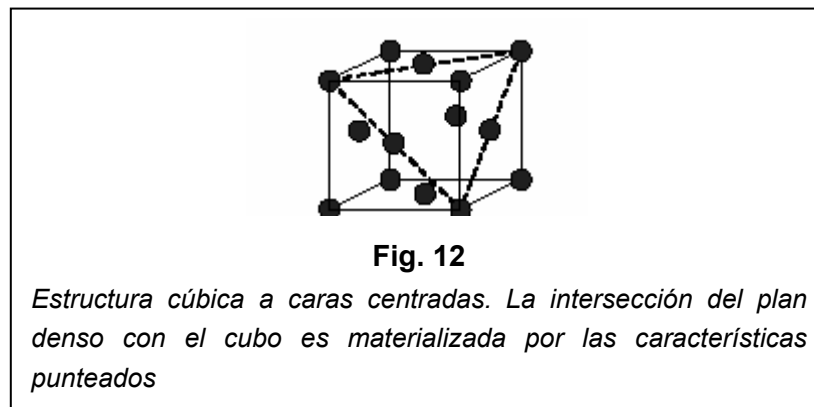
### Fase III

La tensión sobre las dislocaciones bloqueadas se vuelve importante y favorece el deslizamiento cruzado. Se facilita entonces la aniquilación de dislocaciones. La densidad de dislocaciones se estabiliza. LA velocidad de endurecimiento tiende a disminuir gradualmente con la deformación.

## 2.3.2.2. Aplicación a la estructura metálica Cúbica Cara Centrada (FCC)

### 2.3.2.2.1 Descripción

Existen varios tipos de redes atómicas diferentes. El cobre, que vamos entonces a utilizar, se solidifica según esta estructura que está representada en la Fig. 12





En un monocristal de estructura FCC los planes de deslizamiento activables son los 4 planes de tipo  $\{111\}$ , contando con cada uno 3 direcciones densas  $\langle 110 \rangle$ . la estructura FCC tiene pues 12 sistemas de deslizamientos. La notación de Schmid y Boas asigna una letra a cada plano de deslizamiento y una cifra al vector de Burgers. La correspondencia se da en la tabla 1

Normale au plan de glissement	Vecteur de Burgers	Systèmes de glissement potentiels
A $(\bar{1}11)$	1 $[011]$	
B $(11\bar{1})$	2 $[0\bar{1}1]$	A2 A3 A6
C $(\bar{1}\bar{1}1)$	3 $[101]$	B2 B4 B5
D $(1\bar{1}\bar{1})$	4 $[\bar{1}01]$	C1 C3 C5
	5 $[\bar{1}10]$	D1 D4 D6
	6 $[110]$	

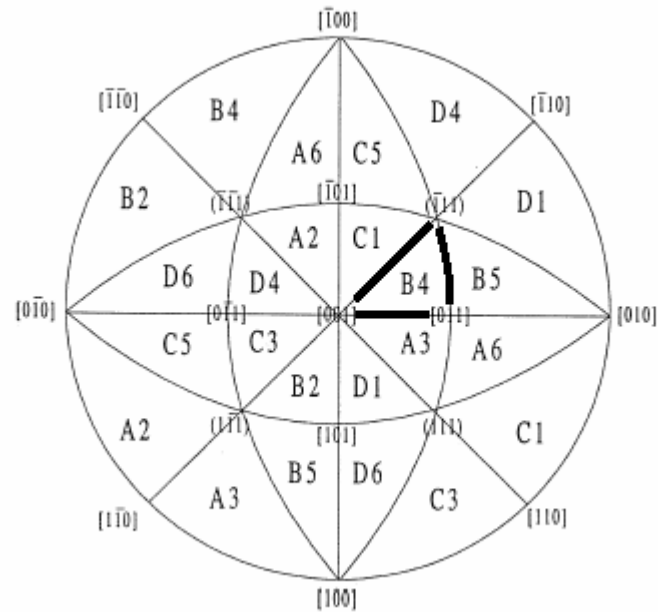
**Tabla 1**

*Convenio de Schmid y Boas para designar los sistemas de deslizamiento en la estructura fcc*

#### 2.3.2.2.2 Proyección estereográfica

Para saber cuales son los sistemas de deslizamientos activos, es decir, los según los cuales el cristal se deforma, según la dirección del carga, existe una representación generalmente utilizada que es la proyección estereográfica de Taylor y Elam Fig.13





**Fig. 13**

*Proyección estereográfica que evidencia las simetrías de la estructura cúbica a caras centradas y el triángulo estándar (en negrita). los sistemas que se pueden activar en tracción unido axial se dan para cada triángulo*

Todos los triángulos que aparecen sobre la proyección son idénticos del punto de vista cristalográfico.

Si el punto de la proyección estereográfica de la tensión se sitúa en un triángulo, solo el sistema correspondiente será activo, si se sitúa en una línea entre 2 triángulos, entonces los 2 sistemas correspondiendo será activo, y de mismo si se sitúa a la intersección entre 3 triángulos 3 de sistemas se producirán. El triángulo cuyas cumbres tienen [ 001], [011], y [ - 111 ] se llama triángulo normal, permite describir el comportamiento general de la estructura

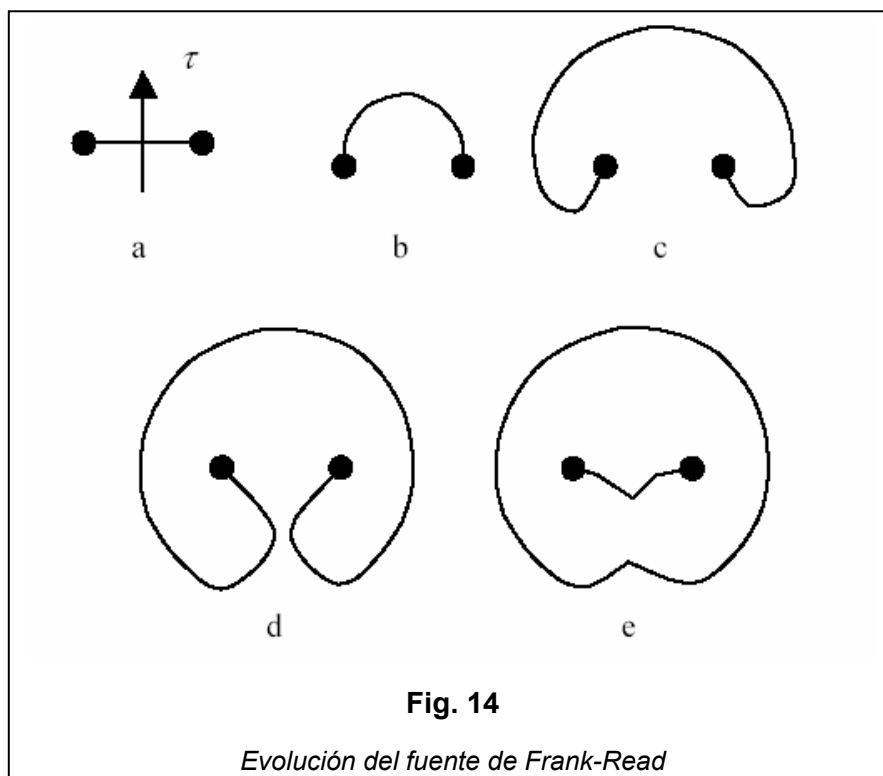
### 2.3.2.3. Los distintos mecanismos responsables de la deformación plástica

Distintos mecanismos operan con distintos grados de importancia en la deformación plástica. La preponderancia de un mecanismo esta controlada por el tipo de estructura, las condiciones experimentales (temperatura) y el tipo de deformación alcanzado. Parece importante conocer bien todos los mecanismos y su papel cuando se desea construir un modelo de la plasticidad. El objeto de este apartado es pues presentar todos los mecanismos que pueden manifestarse entonces de la deformación.



### 2.3.2.3.1 Producción

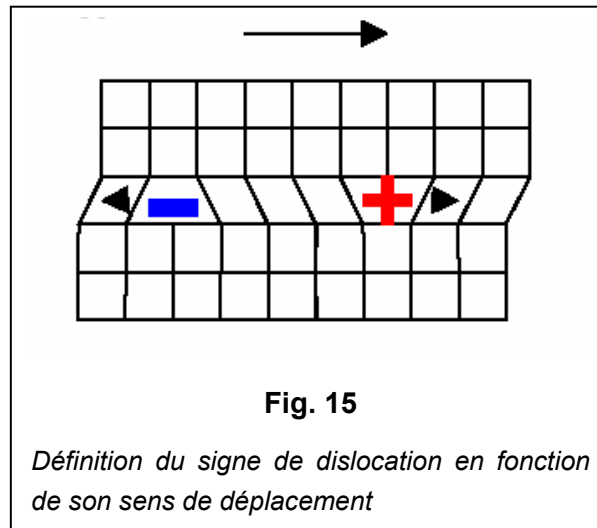
En 1950, Frank y Read determinaron el mecanismo de producción de las dislocaciones que opera de manera preponderante en las estructuras FCC. Este mecanismo es al origen de la multiplicación de las dislocaciones en un cristal que se deforma.



La Fig. 14 ilustra el mecanismo. Un segmento de dislocación fijo (a) a sus dos extremidades y sujeto a una tensión resuelta  $\tau$  tiende a alargarse y a curvarse. Cuanto más la dificultad es importante y más el segmento tiene tendencia a tomar una forma de media rodea (b). Las dos extremidades del segmento que se ponen frente a frente son de signos opuestos (c) y (d). Un aumento suplementario de tensión implica la aniquilación de las porciones de segmentos (e). Se obtiene de una parte un bucle autónomo de dislocación que va a seguir dilatándose y de otra parte un segmento, similar al segmento inicial, potencialmente apto a producir un nuevo bucle de dislocación.

A partir de estas consideraciones, se define arbitrariamente un signo asociado al segmento de dislocación relativamente a la dirección de la tensión resuelta. El segmento que se desplaza en la dirección de la dislocación esta asignado del signo + y el segmento en la dirección opuesta esta asignado del signo - (Fig. 15).



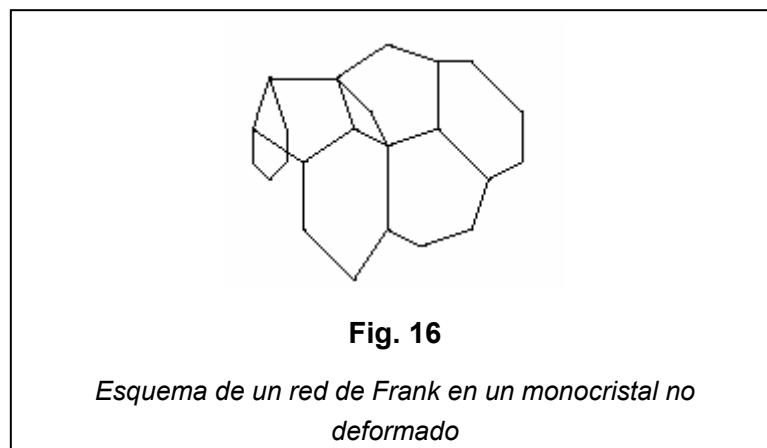


La forma circular que toma el segmento de dislocación bajo la tensión es explicada por minimización de la energía de la línea de dislocación. Se demuestra entonces que el mecanismo de producción Frank-Read se activa si la tensión sobre el segmento de dislocación es inversamente proporcional al radio de curvatura  $R$  de la dislocación:

$$\tau \approx \frac{\alpha \mu b}{R}$$

dónde  $b$  es la norma del vector de Burgers,  $\mu$  el módulo de cizalladura del material, y  $\alpha$  es un coeficiente de proporcionalidad.

Un monocristal es raramente perfecto. Las dislocaciones se agrupan en una estructura llamada red de Frank (Fig. 16). Los puntos de anclaje de las dislocaciones son las intersecciones de las líneas de dislocaciones que pertenecen a diferentes sistemas.



Se vincula pues la escisión límite máximo sobre un sistema con el tamaño característico  $R_f$  de esta red que define la distancia media entre los puntos de anclaje



utilizando la relación de proporcionalidad definida por la ecuación:

$$\tau_{\mu} = \frac{\alpha \mu b}{R_f}$$

Se considera en general que el espaciado entre los puntos de anclaje es inversamente proporcional a la raíz cuadrada de la densidad de dislocaciones  $\rho$ . Se obtiene entonces una estimación de la tensión límite máximo para un sistema:

$$\tau_{\mu} = \alpha \mu b \sqrt{\rho} \quad (\text{Ec. 2.17})$$

Este mecanismo se aplica especialmente bien para las estructuras de tipo FCC por ejemplo, para el cobre se encontró la relación aquí arriba con  $\alpha = 0.3$

#### 2.3.2.3.2 Fricción en la red

La dislocación que progresa en la estructura cristalina está sucesivamente en interacción fuerte o escasa con sus átomos vecinos. Estas fuerzas se conocen bajo el nombre de "Fuerzas de Peierls Nabarro". Esta fuerza se parece una fricción que varía periódicamente con una longitud de onda dado por el espacio entre los planes atómicos. Se demuestra que la fuerza de fricción es tanto más escasa que:

El plan de deslizamiento es denso

El centro de la dislocación se extiende en el plan de deslizamiento

La fricción de red controla aún más las dislocaciones tornillo que, en general, se disocian más que las dislocaciones cuña. El mecanismo de progresión de las dislocaciones en los materiales de alto nivel de fuerza de Peierls se describe de la manera siguiente.

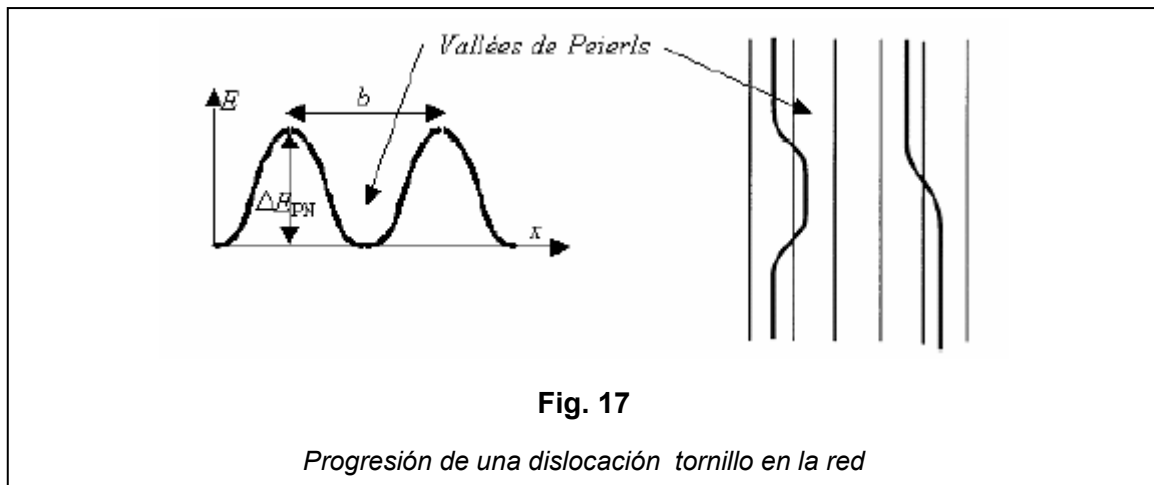
Al principio de la deformación las dislocaciones cuña progresan aunque las dislocaciones tornillo se queden bloqueadas en las zonas de interacción fuerte.

Esta fase previa se llama preplástico en razón de la muy escasa deformación plástica generada

El bloqueo rápido de las dislocaciones cuña implican de una parte el aumento de la tensión aplicada, de otra parte, la implicación de las dislocaciones tornillo en la deformación a través de un mecanismo específico de doble revés.



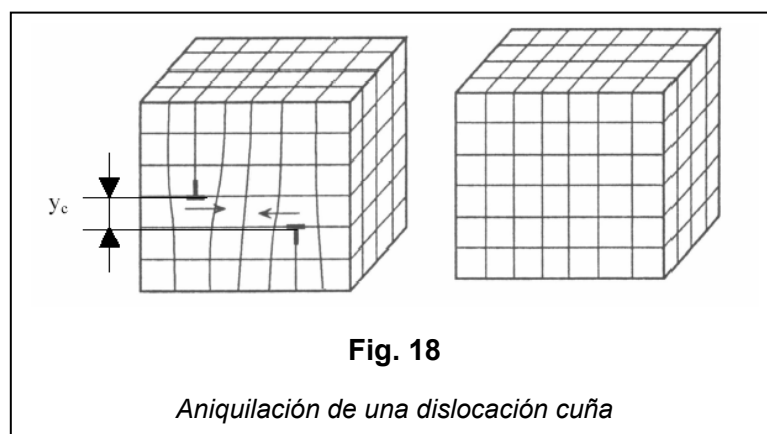
La progresión del tornillo es descrita por el modelo simple siguiente. Se presenta su desplazamiento por la progresión de doble revés a carácter cuña o mixta que hacen pasar el tornillo de una posición estable (conexión fuerte con la red) a una otra posición estable (Fig. 17)



#### 2.3.2.3.3 Aniquilación

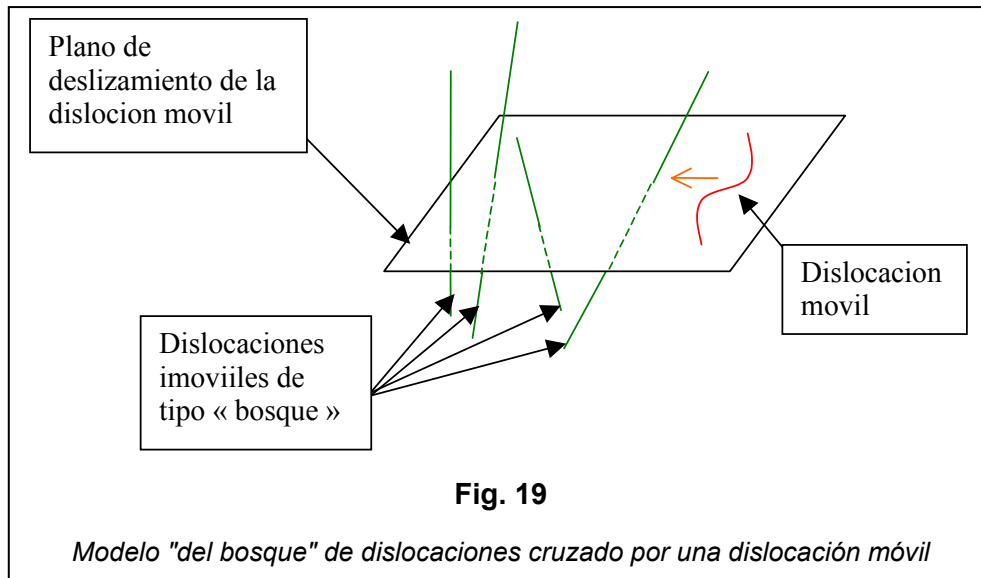
Dos dislocaciones cuñas que deslizan sobre un mismo plan con signos opuestos se atraen. Además, cuando las dos dislocaciones están frente a frente, los medio planes suplementarios van a agruparse para formar un plan completo:

La línea de dislocación desaparece. Este mecanismo se llama aniquilación. Puede producirse aunque los planes de deslizamiento son separados por algunas distancias atómicas (Fig. 18). La distancia de separación máxima de los planes depende de la agitación térmica de los átomos, por lo tanto de la temperatura



#### 2.3.2.3.4 Formación de una unión

Cuando una dislocación progresa, encuentra líneas de dislocación de otros sistemas que taladran su plan de deslizamiento. Estas dislocaciones se califican de "bosque" relativamente al sistema activo. ( Fig. 19)



Cuando dos dislocaciones a y b de vectores de Burgers respectivos  $b_a$  y  $b_b$  se encuentran, es posible que una unión se forma. El vector resultante de esta combinación es la suma de los vectores iniciales. La Energía elástica de la línea de dislocación es proporcional al cuadrado del módulo del vector de Burgers.

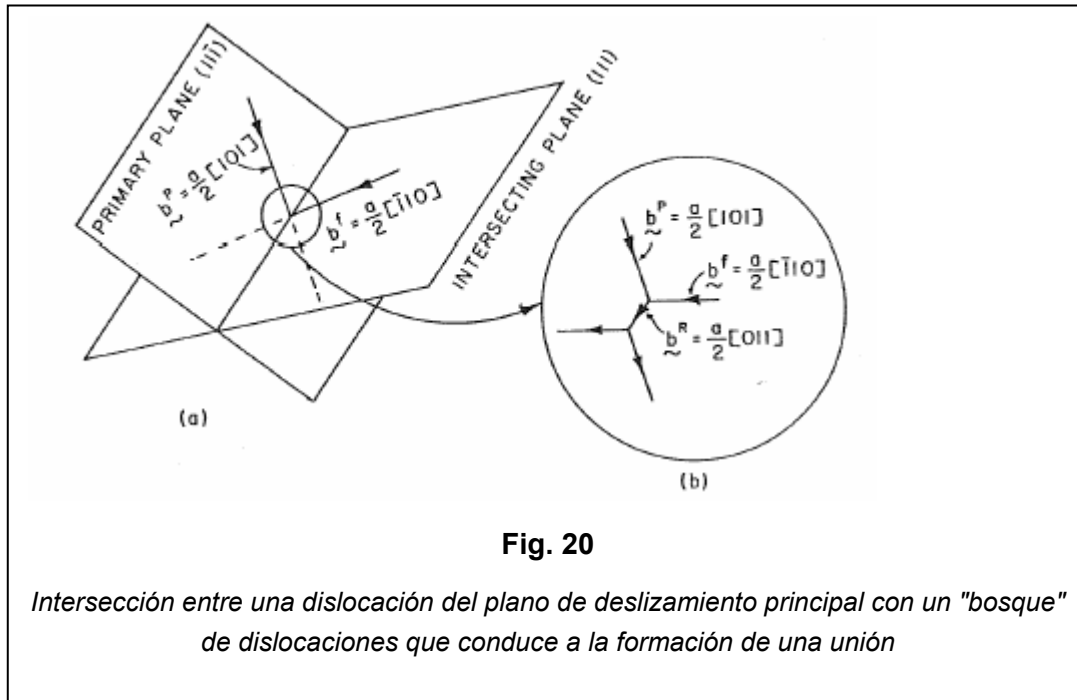
Así pues, la formación de unión (Fig. 20) es posible si la energía de la combinación es inferior a la suma de las energías iniciales de las dos dislocaciones a y b, es decir si:

$$b_a^2 + b_b^2 > (b_a + b_b)^2$$

eso equivale a:

$$b_a \cdot b_b < 0$$





Si se tiene a  $b_a \cdot b_b > 0$ , entonces las dislocaciones no se arman. Las interacciones entre las dislocaciones obstaculizan su movimiento y contribuyen a endurecer el metal sujeto a una deformación plástica

#### 2.3.2.3.5 Disociación de dislocaciones

Recíprocamente al fenómeno anterior, es posible que una dislocación de vector de Burgers  $b$  pueda disociarse en dos dislocaciones parciales de vector de Burgers  $b_1$  y  $b_2$  para minimizar su energía

Se obtiene la misma forma de relación que anteriormente para que la disociación sea posible:

$$b^2 > b_1^2 + b_2^2$$

Este balance energético es una primera aproximación ya que no tiene en cuenta ni la energía de interacción  $W_{int12}$  ni la energía de falta de apilamiento de la red  $W_{emp}$  generada más tarde. Todas las energías mencionadas en este apartado son definidas por unidad de longitud. La Energía total  $W_{tot}$  de dos dislocaciones parciales disociadas de energía respectivas  $W_1$  y  $W_2$  es pues:

$$W_{tot} = W_1 + W_2 + W_{int12} + W_{emp}$$





Se llama  $\omega_{emp}$  la energía por unidad de superficie asociada al defecto de apilamiento. Si  $d$  es la longitud de la banda asociada, la energía que se debe proporcionar para fabricar el defecto es

$$W_{emp} = \omega_{emp} \cdot d$$

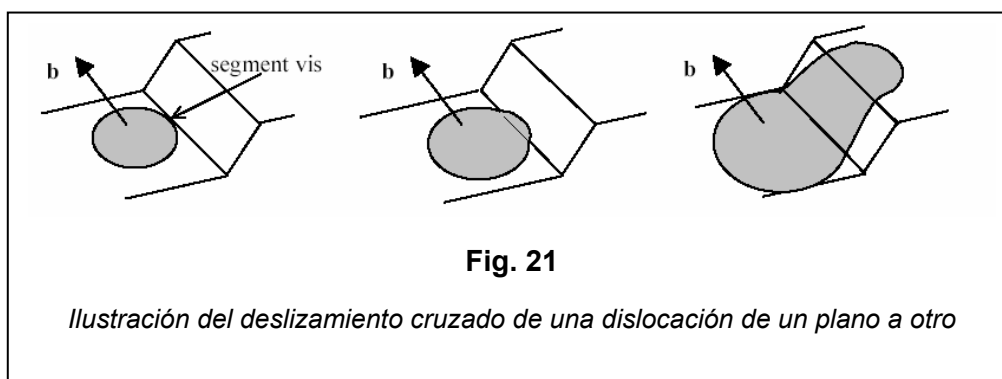
Al equilibrio la energía total es mínima. La anchura de la banda  $d_{stable}$  de la disociación corresponde a una energía total mínima. Para la configuración de equilibrio, la expresión de la derivada de la energía total, en la cual la energía de apilamiento se prorratea debe ser nula. Las energías individuales de las parciales no dependen de la anchura del defecto, se obtiene entonces:

$$\left. \frac{\partial W_{int12}}{\partial d} \right|_{d=d_{stable}} = -\omega_{emp}$$

Cuanto más la energía de falta de apilamiento es elevado (es decir menos el material acepta de desorden en el apilamiento atómico), menos la disociación es importante. Las faltas de apilamiento son diferentes en función de los materiales.

#### 2.3.2.3.6 Deslizamiento cruzado

Las dislocaciones deslizan de manera preferencial en los planos más densos. El problema de la elección del plan de deslizamiento se plantea cuando el vector de Burgers es común a varios planos de deslizamiento. La parte tornillo de una dislocación (cuyo dirección de deslizamiento es colineal al vector de Burgers) puede cambiar de plano. Se llama este mecanismo el deslizamiento cruzado. Este fenómeno va a permitir a las dislocaciones tornillo desplazarse más fácilmente cambiando de plano para evitar los obstáculos



El deslizamiento cruzado se dificulta por la disociación de la dislocación en parciales en el plano de deslizamiento inicial. Salvo que las parciales iniciales son paralelas al



vector de Burgers inicial, es necesario entonces combinar de nuevo a los dos parciales para desviarse luego disociarlos otra vez en el nuevo plan de deslizamiento. Este proceso de recombination-dissociation sobre parciales es claramente sensible a la temperatura. El deslizamiento cruzado se puede considerar como un mecanismo térmicamente activado

#### 2.3.2.4. Clasificación de los distintos mecanismos

Algunos mecanismos de paso relacionados a la movilidad de las dislocaciones son afectados por los cambios de temperatura. Todos los átomos de una línea de dislocación vibran en permanencia con una amplitud que aumenta si la temperatura aumenta. El desarrollo del deslizamiento cruzado se ve, por ejemplo, facilitado por esta vibración.

Se califica "térmicamente activado" a un proceso cuyo desencadenamiento tiene una dependencia con la temperatura. En el caso contrario, será "atémico". Los mecanismos se guardan pues en dos grandes categorías en función de su dependencia a la temperatura (tabla 2)

Mecanismo	térmicamente activado	"atémico".
Progresión en una estructura cristalina controlada por las fuerzas de Peierls	✓	
Creación de una interacción repulsiva		✓
Creación de una unión atractiva		✓
Interacción con una dislocación colineal	✓	
Formación de dipolo cuna	✓	
Deslizamiento cruzado	✓	
Creación de fuentes de Frank-Read		✓

**Tabla 2**

*Cuadro de clasificación de los mecanismos en función de su carácter térmico o no*



### 2.3.2.5. Leyes de comportamiento

Si la cinemática del monocristal, como acabamos de describirla, es bien conocida, la puesta a punto de relaciones de comportamiento es un tema todavía abierto a discusión que requiere del conocimiento de mecanismos físicos a fin de construir un modelo fiable. Entre los distintos modelos que describen el comportamiento elasto-viscoplástico de monocristales, presentaremos uno que es muy interesante porque cada una de sus relaciones de comportamiento se pueden justificar a partir de la descripción de la cinemática de las líneas de dislocación. Este modelo sirve para los metales FCC

#### 2.3.2.5.1 Leyes constitutivas del modelo de plasticidad cristalina

Desde 1960 los metalurgistas, han intentado explicar el comportamiento plástico de los cristales a partir de fenómenos físicos que son responsables de la plasticidad. En el caso de la modelización de la deformación plástica de los cristales, estos estudios necesitan entender la dinámica de las líneas de dislocación que son principalmente responsables de la deformación plástica de los materiales dúctiles

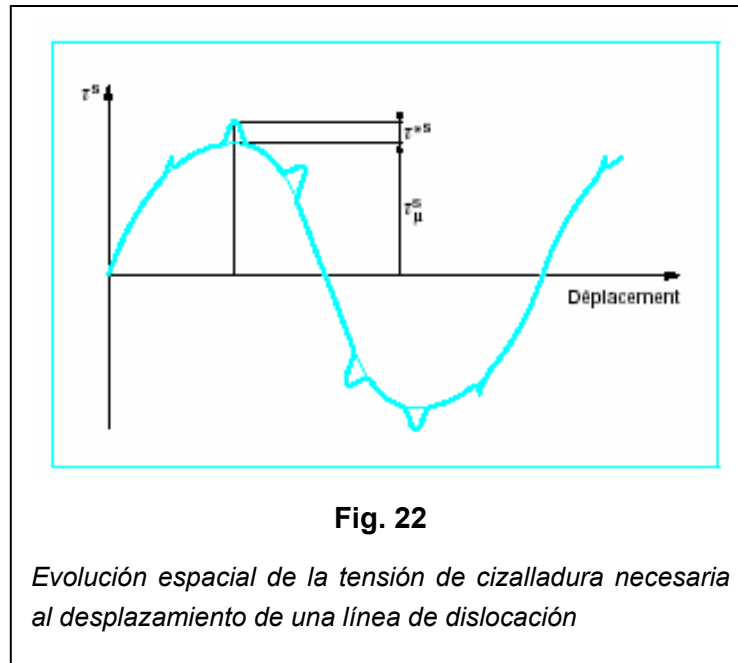
Miramos el movimiento de una dislocación aislada que se desplaza sobre el sistema de deslizamiento  $s$  y puesto en un campo de coacción heterogénea. Suponemos que el deslizamiento está gobernado por los obstáculos. Estos obstáculos pueden ponerse en 2 categorías

-los que producen coacciones a larga distancia  $\tau_{\mu}^s$  como los empinamientos sobre los juntas de grano o sobre los precipitados (que no hemos tratados en el capítulo precedente)

-los que producen un campo de coacciones a pequeña distancia,  $\tau^{*s}$ , como las líneas de dislocaciones que atraviesan los planos de deslizamiento del sistema  $s$  (los “árboles del bosque”), o también las impurezas dentro del material

$\tau_{\mu}^s$  no depende de la temperatura, mientras que  $\tau^{*s}$  está activada por ella. Esta distinción nos permite definir un perfil en el espacio, de  $\tau^s$ , necesario al movimiento de la dislocación, que muestra estas dos contribuciones. La Fig. 22 muestra un perfil típico de coacción resuelta a una temperatura dada.





Si consideramos solo el endurecimiento isótropo, el perfil de la coacción atérmica  $\tau^s_\mu$ , parece como una función periódica de mediana nula y de grande larga de onda. Cuando una dislocación encuentra un obstáculo local que actúa a algunas distancias atómicas de su propia posición, la dislocación necesita un pequeño suplemento de amplitud  $\tau^{*s}$ , para conseguir salvar el obstáculo. Luego, se tiene que

$$\tau^s = \tau^s_\mu + \tau^{*s},$$

A partir de estas consideraciones, y despreciando el tiempo de vuelo de la dislocación frente a su tiempo de espera sobre los obstáculos, se puede escribir su velocidad como [1](ver el cuadro de las notaciones y de los símbolos):

$$v = \frac{bv_D}{\exp\left(\frac{\Delta G_0}{kT}\right) \left[ 2sh\left(\frac{\tau^{*s}\Delta V^*}{kT}\right) \right]^{-1}} \quad (\text{Ec. 2.18})$$

El pasaje del comportamiento de una dislocación a el de la densidad de dislocación sobre el sistema s se hace usando la relación de Orowan Ec(2.15)  
Suponiendo que la velocidad mediana de todas las dislocaciones móviles del sistema sigue una ley idéntica



Cuando el valor de,  $\tau^{*s}$ , es pequeño (menos del 70% del valor a 0 K,  $\tau_0^{*s}$ ) , se considera que la probabilidad de saltos inversos es despreciable y el seno hiperbólico de la ecuación 3.18 se restringe solo su componente de exponencial negativa. Reemplazando  $\tau^{*s}$  por  $\tau_\mu^s - \tau^s$ , el desarrollo limitado(DL)de 1er orden en  $\tau^{*s} / \tau_\mu^s$  da, al final[2]

$$\dot{\gamma}^s = \rho_m^s b^2 v_D \exp\left(\frac{-\Delta G_0}{kT}\right) \left| \frac{\tau^s}{\tau_\mu^s} \right|^{\frac{\tau_\mu^s \Delta V^*}{kT}} \text{sign}(\tau_s) \quad (\text{Ec. 2.19})$$

Si se tiene que

$$\dot{\gamma}_0^s = \rho_m^s b^2 v_D \exp\left(\frac{-\Delta G_0}{kT}\right) \quad \text{y} \quad n = \frac{\tau_\mu^s \Delta V^*}{kT} \quad (\text{Ec. 2.20})$$

obtenemos la relación de deformación plástica con una forma clásica :

$$\dot{\gamma}^s = \dot{\gamma}_0^s \left| \frac{\tau^s}{\tau_\mu^s} \right|^n \text{sign}(\tau^s) \quad (\text{Ec. 2.21})$$

Insistimos sobre las hipótesis que implican a esta formula. La ecuación (2.21) se evalúa a valores no muy grandes de  $\tau^{*s}$  . Además el DL puede evaluarse si  $\tau^{*s} \ll \tau_\mu^s$  . Estas condiciones están satisfechas por la mayor parte de metales fcc si T es inferior a 0.3 T<sub>f</sub> (régimen de deformación en frío). Los parámetros  $\dot{\gamma}_0^s$  y n fueron obtenidos con una mediana sobre todas las dislocaciones movibles de un mismo sistema y por eso, las 3 variables  $\tau^{*s}$ ,  $\Delta G_0$ ,  $\Delta V^*$  de las que dependen los parámetros  $\dot{\gamma}_0^s$  y n , deben de ser consideradas como coeficientes fenomenológicos aunque tengan un significado físico .Es decir que el valor que tenemos que atribuir al estos parámetros deberá ser determinado a posteriori como vamos a ver en el próximo párrafo

El endurecimiento por deformación plástica del material se determina gracias a la evolución del término  $\tau_\mu^s$  en función de variables internas como la densidad de dislocaciones. Para hacerlo utilizamos la relación clásica de Mecking y Kocks[3]

$$\tau_\mu^s = \alpha \mu b \quad (\text{Ec. 2.22})$$



con  $\alpha$ : constante que vale mas o menos 0.3  
 $\mu$ : modulo de « escisión transversal » (modulo de Coulomb)  
 $\rho$  : densidad de dislocaciones

o también una formula derivada , generalizada sobre los N sistemas de deslizamiento del monocristal

$$\tau_{\mu}^s = \mu b \sqrt{\sum_{u=1}^N d_{su} \rho^u} \quad (\text{Ec. 2.23})$$

Para terminar el problema, la relación de endurecimiento por deformación plástica debe de ser completada con una ley que da la evolución de la densidad de dislocaciones sobre cada sistema de deslizamiento en función de la deformación plástica. La densidad de dislocaciones esta escrita como un balance entre un término de producción y un término de aniquilación [4] que se pueden demostrar a partir de cálculos estadísticos [5]

$$\dot{\rho}^s = \frac{1}{b} \left( \frac{\sqrt{\sum_{u=1}^N d_{su} \rho^u}}{K} - 2 y_c \rho^s \right) |\dot{\gamma}^s| \quad (\text{Ec. 2.24})$$

La ecuación (2.24) implica que la densidad de dislocaciones de un sistema de deslizamiento no puede crecer hasta el infinito y que ella tiende hasta un valor de saturación que depende de las densidades almacenadas durante la deformación sobre todos los sistemas de deslizamiento.

Al final, el modelo cristalino es definido por 3 ecuaciones (2.21),(2.23), (2.24). Una manera mas clásica es la de dar la ley de deformación plástica (2.21) juntamente con una ley de endurecimiento por deformación plástica que une directamente la evolución temporal de la coacción atómica sobre un sistema  $s, \tau_{\mu}^s$  , a las evoluciones de la deformación plástica de todos los sistemas de deslizamiento  $\dot{\gamma}^u$  , con una matriz de endurecimiento por deformación plástica  $h$  . Para establecer semejante relación, solo hay que derivar la ecuación (2.23) y introducir en ésta la expresión de  $\dot{\rho}^s$  obtenida por (2.24)



Así tenemos

$$\dot{\tau}_{\mu}^s = \sum_{u=1}^N h_{su} \dot{\gamma}^u = \sum_{u=1}^N \left[ \frac{\mu \alpha_{su}}{2 \sqrt{\sum_{q=1}^N \alpha_{sq} \rho^q}} \left( \frac{\sqrt{\sum_{p=1}^N a_{up} \rho^p}}{K} - 2 y_c \rho^u \right) \dot{\gamma}^u \right] \quad (\text{Ec. 2.25})$$

con p y q índices mudos

Notamos que las leyes propuestas en este párrafo no permiten simular cambios de trayecto de carga por causa de falta del endurecimiento por deformación plástica en la expresión de la ley de deformación plástica (2.21).

Señalemos por fin, que las expresiones presentadas arriba son evaluables para los metales puros fcc deformados en frío. Para otras estructuras cristalográficas como las cc, cd, o hex y aleaciones industriales con precipites, hay que ver cada de las leyes, empezando de nuevo con la cinética de una línea de dislocación.

#### 2.3.2.5.2 Identificación de los parámetros

Las relaciones de comportamiento descritas antes, utilizan un número reducido de parámetros. Sin contar las constantes del material, hay 5 entidades físicas que tenemos que evaluar: los coeficientes  $\dot{\gamma}_0^s$  y  $n$  de la ley de deformación plástica (2.21), la matriz de interacción  $d$  de la relación de endurecimiento por deformación plástica (2.23)(donde el coeficiente  $\alpha$  de la relación simplificada (2.22) , la distancia de aniquilación  $y_c$ , la constante  $K$  y la matriz de interacción  $\alpha$  de la ecuación de evolución de las densidades de dislocaciones (2.24) Teóricamente ,la modelización que hemos adoptado para determinar éste modelo implica que estos parámetros tienen un significado físico y que los valores a asignarles son directamente calculables analíticamente a partir de medidas experimentales características del material a estudiar. Así, por ejemplo, los dos coeficientes de la ley de deformación plástica se pueden calcular a partir de sus expresiones [ecuación (2.20) y a partir del conocimiento de la energía  $\Delta G_0$  y del volumen de activación  $\Delta V^*$ ]. Con el cobre, a temperatura ambiente, las medidas experimentales dan valores de  $\Delta G_0$  desde  $0.15 \mu b^3$  hasta  $0.25 \mu b^3$  [6], lo que implica que por una densidad de dislocaciones móviles  $\rho_m^s$  del orden de  $10^{10} m^{-2}$  hasta  $10^{12} m^{-2}$ ,  $\dot{\gamma}_0^s$  esta en el intervalo  $[7.6 \cdot 10^{-16} s^{-1}; 3.4 \cdot 10^{-6} s^{-1}]$ . A pesar de la imprecisión por causa de la anchura de los intervalos de  $\Delta G_0$  y  $\rho_m^s$ ,



se nota que el orden de  $\dot{\gamma}_0^s$  es inferior que el que se utiliza generalmente en muchos modelos empíricos (2.18)[7]

El coeficiente  $n$  de la ley de deformación plástica fija la sensibilidad de la coacción a la velocidad de deformación, Consideramos que el volumen de activación se escribe  $\Delta V^* = db / \sqrt{\rho}$  con  $d$  la distancia para salvar el obstáculo (típicamente

$d=4b$  a temperatura ambiente), se puede escribir  $n$  como  $n = \frac{kT}{\alpha d \mu b^2}$ . Notamos que

este formula muestra que  $n$  es independiente de la acción de la densidad de dislocaciones como la ley de Cottrel- Stockes[8] lo explica. Y obtenemos con  $T = 295K$  el valor de  $n = 0.005$ , lo que es confirmado a través de ensayos experimentales por saltos de velocidad de deformación[9]

En la ley de endurecimiento por deformación plástica simplificada (2.22) aparece una constante  $\alpha$  que se puede medir fácilmente experimentalmente [10][11]. En el caso del cobre, las valores que se utilizan normalmente son  $\alpha = 0.3$

Los 4 coeficientes de la matriz  $a$  de la ley de evolución de las densidades de dislocaciones son los representantes de los interacciones geométricas entre los sistemas de deslizamiento y sus influencia sobre el libre recorrido de estas dislocaciones. Consideraciones geométricas muestran que los  $12*12$  coeficientes se resumen en 4 valores independientes  $a_0, a_1, a_2, a_3$ , [12]. Los parámetros  $y_c$  y  $K$  pueden ser también determinados a partir de los datos experimentales, por ejemplo, reproduciendo el índice de endurecimiento por deformación plástica en los grados II y III de la curva de tracción uniaxial (ver 3.5.1). Para hacerlo, se puede ver los trabajos de Bell quien a obtenido centenas de resultados sobre varios metales puros fcc [13] [14]

Todos los parámetros evaluables en monocristales de cobre a temperatura ambiente se muestran en la Tabla 1

El modelo dinámico de las dislocaciones presentado en el apartado 2 permite muy bien de identificar los coeficientes del modelo que utiliza el principio de densidad de dislocaciones. En efecto, se puede de utilizar el código numérico para probar explícitamente un parámetro. Por ejemplo, cada de los coeficientes  $d_{su}$  de la ley de endurecimiento por deformación plástica 3.23 puede ser determinado numéricamente haciendo 2 sistemas  $s$  y  $u$  interactuar entre ellos, y mesurando la coacción de escisión que debe permitir al sistema  $s$  de superar una población de dislocaciones de densidad  $\rho^u$ , puesto en el sistema  $u$  [15]. Se determine así los  $12*12$  coeficientes de la matriz  $d$ , la que, por razones de simetría de la estructura fcc, solo esta constituida de 4 coeficientes independientes  $d_0, d_1, d_2, d_3$ . También se puede “mesurar numéricamente” los valores  $K$  y  $y_c$  a partir de las curvas de densidades de dislocaciones sobre los diferentes sistemas de deslizamiento en función del índice de





deformación [16][17]. Los resultados obtenidos son comparables con los valores deducidos de la literatura, sino la distancia de aniquilación que es un poco pequeña.  
 $y_c = b$

Parámetros	Símbolo	Valor para el cobre
Modulo de cizalladura transversal	$\mu$	42000(MPa)
Modulo del vector de Burgers	$b$	$2.56 \cdot 10^{-10}$ (m)
Velocidad de deformación inicial	$\dot{\gamma}_0^s$	$[7.6 \cdot 10^{-16}; .4 \cdot 10^{-6}]$ (s <sup>-1</sup> )
Coeficiente de sensibilidad a la velocidad	$n$	0.005
Matriz de interacción de endurecimiento por deformación plástica	$d_{su} = \alpha^2$	0.09
Distancia mediana de aniquilación	$y_c$	$3.25b$
Numero de obstáculos antes de la parada	$K$	36
Matriz de interacción de las densidades de dislocaciones	$a_{su}$	$a_0 = 0.6$ $a_1 = 0.77$ $a_2 = 0.96$ $a_3 = 1$

**Tabla 3**

*Valores teoricas de los parámetros de la ley de comportamiento de los monocristales de cobre(según[39])*

### 2.3.3. Teoría de plasticidad cristallisa de Asaro and Rice

#### 2.3.3.1. Medida del endurecimiento latente

El “endurecimiento latente” sobre un sistema ( es decir el endurecimiento que resulta de la actividad de los otros sistemas) se ha medido de esencialmente dos maneras. Un método implica la deformación de cristales grandes en único deslizamiento y después el ensayo de los especímenes alineados para el deslizamiento en otro sistema. El límite elástico en sistemas secundarios(que podemos llamar de la misma manera “sistemas latentes” )después se miden y se comparan a la tensión del flujo alcanzada en el original sistema “primario”. Los resultados son descritos típicamente por una variación del “índice de endurecimiento latente”, el cociente de estas dos tensiones fluencia. El segundo método implica medir la rotación de la malla en los simples cristales que ocurre durante el deslizamiento, como lo hemos descrito en la Fig. 8. El índice de la rotación con deformación puede ser medido, y las discrepancias con predicciones de simple-deslizamiento pueden ser usadas para detectar el endurecimiento por deformación plástica en sistemas latentes. El grado de adelantamiento se puede también medir y utilizar como indicación de la magnitud de endurecimiento latente. Estas dos técnicas no son equivalentes, en la primera,



solamente un sistema es activo en cualquier etapa, mientras que en el segundo por lo menos dos sistemas son simultáneamente activos en el punto donde las límites de deformación plástica se miden para el sistema latente inicial. Para describir los resultados experimentales es ventajoso asumir para el momento una regla de endurecimiento de la forma

$$d\tau_c^{(\alpha)} = \sum_{\beta} h_{\alpha\beta} d\gamma^{(\beta)} \quad (\text{Ec. 2.26})$$

donde  $\tau_c^{(\alpha)}$  es la tensión límite de deformación elástica en el sistema del  $\alpha$ , y  $h_{\alpha\beta}$  los índices de endurecimiento. Los términos no diagonales en la matriz  $h$  representan endurecimiento latente.

En su análisis original de polycristales, Taylor asumió que las índices de endurecimiento latente eran iguales a los índices de auto-endurecimiento, es decir,  $h_{\alpha\beta} = h$  para todos  $\alpha$  y  $\beta$ . Sus experimentos con Elam lo motivó indudablemente para asumir tal endurecimiento isotrópico presentado en el capítulo 3.3.1.1. Es importante de notar, sin embargo, que los adelantamientos de posiciones de la simetría, donde las tensiones de cizalladura son iguales en el sistema secundario, de 2-3° eran comunes en esos experimentos, indicando que el deslizamiento en el primer sistema latente requirió una tensión de cizalladura resuelta levemente más grande que en el sistema primario activo. La regla isotrópica de Taylor fue significada evidentemente para ser aproximada, desde sus antiguos experimentos indicaron realmente que el índice de endurecimiento latente era levemente más grande que el índice de auto-endurecimiento.

Una breve revisión de la medida hecha en 1970 fue dada por Kocks (1970), quién condujo que el cociente medio entre el índice de endurecimiento latente y el índice de auto-endurecimiento es casi 1 para los sistemas de deslizamiento coplanarios (es decir, sistemas que comparten el mismo plano) y entre 1 y 1.4 para los sistemas no-coplanarios. Ésta aparece ser una gama aproximada muy razonable, especialmente para los metales puros con energías bajas de falla de apilamiento (es decir, Al y Cu) en una deformación dada. El trabajo de Franciosi en el cobre y el aluminio es de acuerdo con los resultados anteriores en términos de índices de endurecimiento latente después de deformaciones finitas, aunque los autores estudiaron la variación de índices de endurecimiento latente con la deformación y llegan a algo más complicado que lo descrito por Jackson y Basinski (1967) para el cobre y por Kocks y Brown (1966) para el aluminio. Franciosi encontró que los cocientes de endurecimiento latente aumentan primeramente de 1 a los valores máximos de 1.6-2.2 para el aluminio y a los valores máximos casi dos veces más altos para el cobre. Es importante observar, sin embargo, que estos valores máximos ocurren a pretensión de solamente 0.2%. Los cocientes disminuyen rápidamente a deformaciones más grandes y alcanzan valores cerca de 1.3 y de 15 para el aluminio



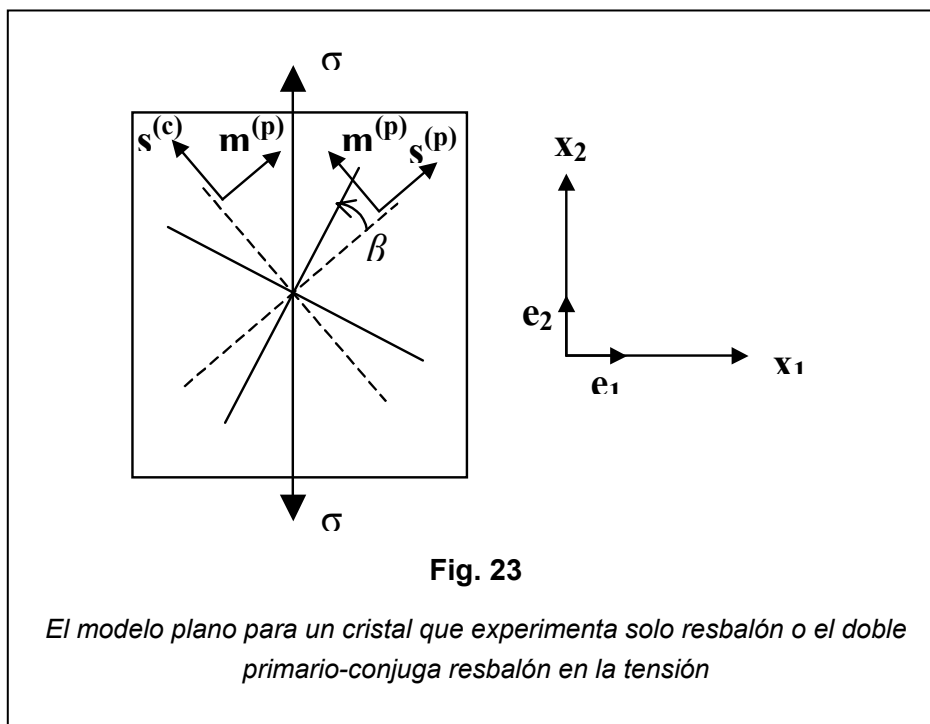
y el cobre, respectivamente

### 2.3.3.2. Leyes constitutivas para los cristales elastoplásticos

El desarrollo de las leyes constitutivas para la deformación elástico-plástica de cristales en deformación finita comenzó con la análisis (1938) de Taylor de la deformación policristalina. Formulaciones más comprensivas han sido presentadas desde entonces por Hill y Rice (1972), Asaro y Rice (1977) y Peirce y otros (1982); una reformulación interesante de los trabajos de Hill y de Rice (1972) ha sido dada por Hill y Havner (1982). Un principio básico de estos análisis es que el material se deforma según el mallado cristalino vía el movimiento de la dislocación como lo hemos descrito previamente, mientras que el mallado sí mismo sufre las deformaciones elásticas. Así hay dos mecanismos físicamente diferentes para deformar y reorientar las fibras plásticas: deslizamiento plástico y deformación del mallado.

Cristalitos, es decir, cristales simples o granos policristalinos, se sujetan generalmente a rotaciones de cuerpo rígido debido a tensiones de contorno o a requisitos de compatibilidad, y se puede de vez en cuando ser conveniente (aunque es arbitrario) considerar esto un tercer mecanismo.

Como ejemplo de algunos principios y pues un prefacio a una formulación cinemática general, es provechoso reconsiderar el problema simple introducido en Fig. 8. Fig. 23 ilustra un modelo más simple de la Fig. 8 para un solo cristal que sufre un deslizamiento en el sistema del deslizamiento ( $\mathbf{s}^{(p)}, \mathbf{m}^{(p)}$ ); para una referencia más última el sistema latente también se indica.



Este modelo se idealiza como plano en ese  $(\mathbf{s}^{(p)}, \mathbf{m}^{(p)})$  y  $(\mathbf{s}^{(c)}, \mathbf{m}^{(c)})$ , junto con el eje de tensión  $T$ , esté en el plano del dibujo. Los  $(\mathbf{s}^{(p)}, \mathbf{m}^{(p)})$  que definan el sistema del deslizamiento  $\alpha$  se toman para ser vectores unitarios ortogonales en el estado de la referencia. La deformación y la rotación totales del cristal cuando está bajo carga viene dada por el gradiente de deformación  $F$ , el cuál se puede descomponer en tres operaciones como siguen. Primero el material sufre un deslizamiento plástico a través la malla no-deformada del cristal según  $F^P$ ; en simple deslizamiento en el sistema  $(s, m)$ , por ejemplo,  $F^P$  puede escribirse siempre como

$$F^P = I + \gamma sm$$

Donde está el  $\gamma$  la deformación de cizalladura medida con respecto a la malla no-deformada. Después, el cristal sufre una rotación rígida  $F^R$ , que, de la discusión referente a la Fig. 8, es impuesto por el constreñimiento especial de la prueba de la tensión que la fibra  $I$  sigue siendo vertical.

Finalmente, bajo la carga, la malla y el material deforman juntos según  $F^e$  y  $I$  deben de seguir siendo otra vez verticales. El gradiente total de la deformación entonces es:

$$F = F^e \cdot F^R \cdot F^P \quad (\text{Ec. 2.27})$$

Donde el gradiente de deformación residual que queda después la carga es:

$$F^{e-1} \cdot F \text{ or } F^R \cdot F^P. \quad (\text{Ec. 2.28})$$

La deformación residual  $F^P$  es debido al desplazamiento plástico solamente, y  $F^R$  es la rotación residual del mallado que explica su reorientación con respecto al eje de tensión (vertical) fijo. Cuando la orientación axial con respecto al mallado es determinada por la difracción de rayos  $X$ , la radiografía del incidente es dirigida según  $I$  y la dirección cristalina paralela a  $I$ . El mallado entonces ha rotado con respecto al marco del laboratorio, y,  $I$ , desarrolla una clase de "textura". Continuaremos el análisis de este modelo más adelante.

Generalmente el gradiente de la deformación se puede escribir referente a Fig. 24 como

$$F = F^* \cdot F^P \quad (\text{Ec. 2.29})$$

Donde  $F^P$  está otra vez la deformación debida solamente a la cizalladura plástica que en sistemas cristalográficos de deslizamiento y a  $F^*$  es causado por el estiramiento y la rotación del mallado cristalino. El gradiente de la deformación restante después de la descarga elástica y después que el mallado haya vuelto a su orientación en el estado de la referencia es  $F^{*-1} \cdot F = F^P$ .

Como el cristal se deforma, los vectores que conectan sitios del mallado se estiran y



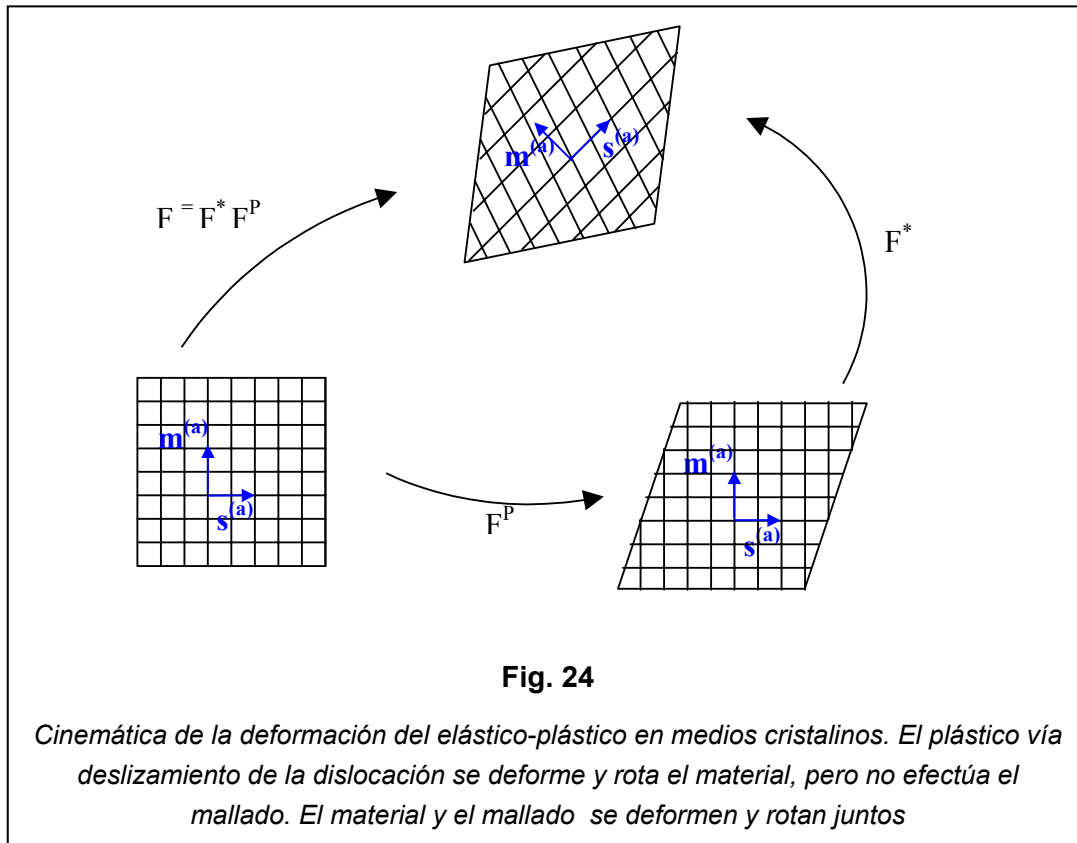
se rotan según  $F^*$ , es decir, ellos cambian con el mallado. Los vectores de dirección de deslizamiento se miran como tales vectores, como otros vectores del mallado en los planos del resbalón. En la configuración de deformación elástica, la dirección del deslizamiento del sistema de deslizamiento entonces se escribe:

$$s^{*(\alpha)} = F^* \cdot s^{(\alpha)} \quad (\text{Ec. 2.30})$$

donde  $s^{(\alpha)}$  está un vector unitario. El normal al plano de deslizamiento  $m^{*(\alpha)}$ , sin embargo, se toma como el producto de cruz de dos vectores ortogonales en el plano del deslizamiento y se escribe:

$$m^{*(\alpha)} = m^{(\alpha)} \cdot F^{*-1} \quad (\text{Ec. 2.31})$$

donde cada  $m^{(\alpha)}$  está también un vector unitario.  $s^{*(\alpha)}$  y  $m^{*(\alpha)}$  no están en general los vectores unitarios, pero siga siendo ortogonal, desde el  $s^{*(\alpha)}$ .  $m^{*(\alpha)} \cdot s^{*(\alpha)} = 0$ .



El gradiente de la velocidad en el estado actual es dado por una fórmula de estándar:

$$L = \dot{\mathbf{v}} \nabla = \dot{\mathbf{F}} \cdot \mathbf{F}^{-1} = \dot{\mathbf{F}}^* \cdot \mathbf{F}^{*-1} + \mathbf{F}^* \cdot \dot{\mathbf{F}}^P \cdot \mathbf{F}^{P-1} \cdot \mathbf{F}^{*-1} \quad (\text{Ec. 2.32})$$



Donde  $L$  también escribirse como

$$L = D + \Omega \quad (\text{Ec. 2.33})$$

Los términos  $D$  y  $\Omega$  son el índice simétrico del el tensor de estiramiento y el índice del tensor de velocidad de rotación, respectivamente. Se descomponen de Ec (2.32) y Fig. 24 en partes, debido al deslizamiento plástico ( $D^P$ ,  $\Omega^P$ ) y deformación de los mallados ( $D^*$ ,  $\Omega^*$ ) como siguen

$$D = D^* + D^P, \Omega = \Omega^* + \Omega^P \quad (\text{Ec. 2.34})$$

donde

$$D^P + \Omega^P = F^* \cdot \dot{F}^P \cdot F^{P-1} \cdot F^{*-1} \quad (\text{Ec. 2.35})$$

Además, puesto que la deformación plástica ocurre por deslizamiento de dislocaciones, encontramos en el estado corriente

$$D^P + \Omega^P = \sum_{\alpha=1}^n \dot{\gamma}^{(\alpha)} s^{*(\alpha)} m^{(\alpha)} \quad (\text{Ec. 2.36})$$

Donde la suma se aplica sobre los sistemas activos y  $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$  es el índice de cizalladura sobre el sistema  $\alpha$  medido relativamente al mallado. En la configuración de referencia observamos, sin embargo,

$$\dot{F}^P \cdot F^{P-1} = \sum_{\alpha=1}^n \dot{\gamma}^{(\alpha)} s^{(\alpha)} m^{(\alpha)} \quad (\text{Ec. 2.37})$$

que significa que la magnitud del desplazamiento del material y la deformación de cizalladura debida al deslizamiento es diferente en la referencia y en las configuraciones actuales. El producto  $\dot{F}^P \cdot F^{P-1}$  está también el incremento residual del gradiente de la deformación después de la descarga elástica y de la vuelta del mallado a su orientación en el estado de la referencia.



Finalmente, observamos que las partes plásticas del índice de estiramiento y del índice de la velocidad de rotación son dadas por las partes simétricas y oblicuas de Ec( 2.36). Si definimos

$$P^{(\alpha)} = \frac{1}{2}(s^{*(\alpha)} m^{*(\alpha)} + m^{*(\alpha)} s^{*(\alpha)}) \quad (\text{Ec. 2.38})$$

y

$$W^{(\alpha)} = \frac{1}{2}(s^{*(\alpha)} m^{*(\alpha)} - m^{*(\alpha)} s^{*(\alpha)}) \quad (\text{Ec. 2.39})$$

Entonces

$$D^P = \sum_{\alpha=1}^n P^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \quad (\text{Ec. 2.40})$$

y

$$\Omega^P = \sum_{\alpha=1}^n W^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \quad (\text{Ec. 2.41})$$

### 2.3.3.3. Leyes constitutivas

Si asumimos que la elasticidad del cristal es inafectada por deslizamiento entonces, después de Hill y de Rice (1972), podemos escribir la ley elástico como

$$\tau^{\nabla*} = L : D^*, \quad (\text{Ec. 2.42})$$

donde L está el tensor del modulo elástico (con el componente formado en los coordenadas fijados en el mallado cristalino) y  $\tau^{\nabla*}$  es el índice de Jaumann de tensión Kirchhoff formado en ejes las que giran con el enrejado

$$\tau^{\nabla*} = \dot{\tau} - \Omega^* \cdot \tau + \tau \cdot \Omega^* \quad (\text{Ec. 2.43})$$

con  $\dot{\tau}$  el índice material de la tensión de Kirchhoff. La tensión de Kirchhoff  $\tau$  se define como

$$\tau = (\rho_0 / \rho) \sigma \quad (\text{Ec. 2.44})$$



donde  $\sigma$  es la tensión de Cauchy y,  $\rho_0$  y  $\rho$  son las densidades materiales en la referencia y los estados actuales. Por otra parte,  $\tau^\nabla$  es el índice de Jaumann de la tensión de Kirchhoff formado con el material

$$\tau^\nabla = \dot{\tau} - \Omega \cdot \tau + \tau \cdot \Omega \quad (\text{Ec. 2.45})$$

y la diferencia entre estas dos índices es

$$\tau^{\nabla*} - \tau^\nabla = \sum_{\alpha=1}^n \beta^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \quad (\text{Ec. 2.46})$$

donde

$$\beta^{(\alpha)} = W^{(\alpha)} \cdot \tau - \tau \cdot W^{(\alpha)} \quad (\text{Ec. 2.47})$$

Donde no hay rotación relativa del material y del mallado o deformación elástica, el lado derecho de Ec (2.46) desaparece y  $\tau^{\nabla*} = \tau^\nabla$ .

Cuando se combina Ec (2.40), (2.41), (2.42), y (2.45), (2.46), la ley constitutiva que resulta es

$$\tau^\nabla = L : D - \sum_{\alpha=1}^n (L : P^{(\alpha)} + \beta^{(\alpha)}) \dot{\gamma}^{(\alpha)} \quad (\text{Ec. 2.48})$$

donde permanece especificar los índices de cizalladura  $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ ; es decir, los  $\dot{\gamma}$  se deben relacionar con o los índices de tensión, o las índices de deformación o el estado actual de la tensión. Antes de desarrollar las relaciones para los  $\dot{\gamma}$ , introducimos una definición particular de la tensión de cortadura resuelta o de la tensión de Schmid. Se ha observado ya que la tensión de cortadura resuelta desempeña un papel vital en la promoción del deslizamiento, puesto que produce una fuerza en dislocaciones. Asaro y Rice (1977) han discutido las varias maneras de las cuales pueden ser logrados, pero para ahora nosotros definiremos  $\tau^{(\alpha)}$  como la “tensión de Schmid” en el sistema de deslizamiento  $\alpha$  de modo que  $\tau^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)}$  esté exacto el índice de endurecimiento debido al deslizamiento sobre el sistema  $\alpha$  por unidad de referencia de volumen. Entonces de la expresión general para este índice del trabajo,

$$\tau : D^p = \sum_{\alpha=1}^n \tau : P^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \quad (\text{Ec. 2.49})$$





Identificamos

$$\tau^{(\alpha)} = P^{(\alpha)} : \tau \quad (\text{Ec. 2.50})$$

El índice del cambio de  $\tau^{(\alpha)}$  puede ser calculado de derivadas materiales del tiempo, de  $P^{(\alpha)}$  y  $\tau$ ,

$$\dot{\tau}^{(\alpha)} = \dot{P}^{(\alpha)} : \tau + P^{(\alpha)} : \dot{\tau} \quad (\text{Ec. 2.51})$$

o de las dos derivadas del corotacional introducidas previamente, a saber,

$$\dot{\tau}^{(\alpha)} = P^{\nabla*}(\alpha) : \tau + P^{(\alpha)} : \tau^{\nabla*} \quad (\text{Ec. 2.52})$$

y

$$\dot{\tau}^{(\alpha)} = P^{\nabla}(\alpha) : \tau + P^{(\alpha)} : \tau^{\nabla} \quad (\text{Ec. 2.53})$$

es interesante observar particularmente

$$P^{\nabla*}(\alpha) : \tau = \beta^{(\alpha)} : D \quad (\text{Ec. 2.54})$$

con lo que  $\dot{\tau}^{(\alpha)}$  puede también ser calculado a partir de

$$\dot{\tau}^{(\alpha)} = P^{(\alpha)} : \tau^{\nabla*} + \beta^{(\alpha)} : D^* \quad (\text{Ec. 2.55})$$

La ecuación 2.54 se puede también derivar de la relación “giratoria” más general dada por Hill y Havner [1982, Ec (2.29)] De la ecuación (2.55) y (2.43) también tenemos que

$$\dot{\tau}^{(\alpha)} = (P^{(\alpha)} : L + \beta^{(\alpha)}) : D^* = \lambda^{(\alpha)} : D^* \quad (\text{Ec. 2.56})$$

lo que permite que construyamos otra vez la Ec (2.48) como

$$\tau^{\nabla} = L : D - \sum_{\alpha=1}^n \lambda^{(\alpha)} : \dot{\gamma}^{(\alpha)} \quad (\text{Ec. 2.57})$$



a condición que  $L_{ijkl}$  sea simétrico en los índices pares  $ij$  y  $kl$ . Además, con la expectativa que  $L^{-1}$  existe, funcionando con él las producciones en Ec (2.57)

$$D = L^{-1} : \tau^{\nabla} + \sum_{\alpha=1}^n \mu^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \quad (\text{Ec. 2.58})$$

con

$$\mu^{(\alpha)} = L^{-1} : \lambda^{(\alpha)} = P^{(\alpha)} + L^{-1} : \beta^{(\alpha)} \quad (\text{Ec. 2.59})$$

Finalmente, de Ec (2.56) y (2.55) y de las simetrías de  $P^{(\alpha)}$ ,  $\beta^{(\alpha)}$  y  $L^{-1}$ ,  $\dot{\tau}^{(\alpha)}$  se expresa alternativamente como

$$\dot{\tau}^{(\alpha)} = \mu^{(\alpha)} : \tau^{\nabla*} \quad (\text{Ec. 2.60})$$

o Asaro y Rice (1977) y Peirce y otros (1982)

$$\dot{\tau}^{(\alpha)} = m^{*(\alpha)} \cdot (\tau^{\nabla*} - D^* \cdot \tau + \tau \cdot D^*) \cdot s^{*(\alpha)} \quad (\text{Ec. 2.61})$$

#### 2.3.3.4. Leyes de endurecimiento por deformación para los cristales no sensibles a los índices

##### 2.3.3.4.1 Ley de Schmid y normalidad plástica

Según lo mencionado anteriormente, la ley de Schmid de una tensión de cortadura resuelta crítica tiene confirmación experimental aproximada en cristales de la FCC. Es importante observar, sin embargo, que tal verificación se ha obtenido para la mayor parte de cristales deformados en las índices casi estáticas en tensión o la compresión. La micro mecánica del deslizamiento, por otra parte, sugiere que existan las desviaciones de la ley de Schmid, aunque pueden ser pequeños. Sin embargo, La ley de Schmid proporciona un punto de partida valioso en la formulación de leyes de endurecimiento por deformación o las relaciones cinéticas para el movimiento de dislocaciones que se pueden después enmendar para explicar el deslizamiento



cruzado, el trepado, u otros procesos micro mecánicos que son influenciados por los componentes de la tensión con excepción de la tensión de cortadura resuelta.

Para adaptar la regla de Schmid a la deformación plástica podemos indicar simplemente que para que la deformación plástica comience por el sistema del deslizamiento  $\alpha$ ,  $\tau^{(\alpha)}$  debe alcanzar un valor crítico  $\tau_c^{(\alpha)}$  determinada por la densidad de dislocación y la subestructura actuales. La selección de sistemas para el cuales  $\tau^{(\alpha)} = \tau_c^{(\alpha)}$  es la selección de sistemas potencialmente activos o críticos; asumimos que son  $n$  de éstos. Para que el sistema  $\alpha$  a sigue siendo activo,  $\tau^{(\alpha)}$  debe aumentar (y permanecer en) al valor crítico  $\tau_c^{(\alpha)}$ , el cuál cambie según:

$$\dot{\tau}^{(\alpha)} = \dot{\tau}_c^{(\alpha)} = \sum_{\beta=1}^n h_{\alpha\beta} \dot{\gamma}^{(\beta)}, \quad \dot{\gamma}^{(\alpha)} > 0 \quad (\text{Ec. 2.62})$$

Si un sistema critica es inactivo

$$\dot{\tau}^{(\alpha)} \leq \dot{\tau}_c^{(\alpha)} = \sum_{\beta=1}^n h_{\alpha\beta} \dot{\gamma}^{(\beta)}, \quad \dot{\gamma}^{(\alpha)} = 0 \quad (\text{Ec. 2.63})$$

Para los sistemas no críticos hay solamente la desigualdad

$$\dot{\tau}^{(\alpha)} \leq \dot{\tau}_c^{(\alpha)}, \quad \dot{\gamma}^{(\alpha)} = 0 \quad (\text{Ec. 2.64})$$

Los  $h_{\alpha\beta}$  son los índices instantáneos de endurecimiento de los planos de deslizamiento;  $h_{\alpha\alpha}$  es el índice del auto endurecimiento sobre el sistema  $\alpha$  y  $h_{\alpha\beta}$  ( $\alpha \neq \beta$ ) es el índice del endurecimiento latente del sistema  $\alpha$  (si es activo o no) causado por deslizamiento sobre el sistema  $\beta$ . Para incluir flujo plástico reverso, es común definir separadamente sistemas positivos y sistemas negativos, es decir,  $(s^{(\alpha)}, m^{(\alpha)})$  y  $(-s^{(\alpha)}, m^{(\alpha)})$ , de modo que positivo (o cero)  $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$  sean permitidos. Para los cristales fcc hay 24 sistemas,  $n$  es el número de los sistemas potencialmente activos para los cuales  $\tau^{(\alpha)} = \tau_c^{(\alpha)}$ , y para un cristal fcc,  $n \leq 12$  en cualquier punto del cristal. También ha sido común asumir que  $h_{\alpha\beta}$  no dependa de la selección actual de sistemas activos o en el cociente de los  $\dot{\gamma}$  positivos. Esto se debe ver como una suposición del modelo, cuya exactitud no está todavía clara.

El cuadro estático, entonces, en el espacio de tensiones bajo carga es el sistema de planos  $\tau^{(\alpha)} = \tau_c$  definiendo el limite de deformación plástica. Cuando la carga cambia o el cristal deforme o rota,  $\tau^{(\alpha)}$  cambia según lo prescrito previamente. Una estructura de la normalidad acompaña esta versión de la ley de Schmid.

Suponga que la tensión actual estaba en el límite en un plano de deformación elástica  $\tau^{(\alpha)} = \tau_c$  o en una esquina común a varios planos. Los cambios de la tensión que



invocarían una respuesta puramente elástico del sistema  $\alpha$  son los que tienden a disminuir  $\tau^{(\alpha)}$ , es decir,

$$\dot{\tau}^{(\alpha)} = \lambda^{(\alpha)} : D^* = \mu^{(\alpha)} : \tau^{\nabla*} \leq 0 \quad (\text{Ec. 2.65})$$

El vector  $\mu^{(\alpha)}$  es entonces el normal dirigido hacia el exterior del plano de deformación plástica del sistema  $\alpha$ . Puesto que, según Ec (2.58), la parte plástica del índice de deformación contribuida por el sistema  $\alpha$  es  $\mu^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)}$ , se dirige necesariamente a lo largo del normal  $\mu^{(\alpha)}$ . Alternativamente, escribiendo de nuevo Ec (2.65) como

$$\mu^{(\alpha)} : L : D^* = L : \mu^{(\alpha)} : D^* \leq 0 \quad (\text{Ec. 2.66})$$

se ve, según lo observado por Hill y Rice (1972), que cualquier incremento de la deformación plástica pura tiene un producto escalar no positivo con cualquier incremento de deformación elástico. Así, según lo demostrado originalmente por Rice (1971) e Hill y Rice (1972), la ley de Schmid utilizando  $\tau^{(\alpha)}$ , según lo definido en Ec (2.50) conduce exactamente a la normalidad en variables conjugadas

Combinando Ec (2.62) y (2.63), con Ec(2.60) y (2.56) luego

$$\lambda^{(\alpha)} : D^* = \mu^{(\alpha)} : \tau^{\nabla*} \leq \sum_{\beta=1}^n h_{\alpha\beta} \dot{\gamma}^{(\beta)}, \quad \dot{\gamma}^{(\alpha)} = 0 \quad (\text{Ec. 2.67})$$

$$\lambda^{(\alpha)} : D^* = \mu^{(\alpha)} : \tau^{\nabla*} = \sum_{\beta=1}^n h_{\alpha\beta} \dot{\gamma}^{(\beta)}, \quad \dot{\gamma}^{(\alpha)} > 0 \quad (\text{Ec. 2.68})$$

Alternativamente, después de Hill y de Rice (1972), Ec (2.67) y (2.68), se puede expresar en términos de índice de deformación material total D, usando Ec(2.34) y (2.40) como

$$\lambda^{(\alpha)} : D^* > \sum_{\beta=1}^n g_{\alpha\beta} \dot{\gamma}^{(\beta)}, \quad \dot{\gamma}^{(\alpha)} = 0 \quad (\text{Ec. 2.69})$$

$$\lambda^{(\alpha)} : D^* = \sum_{\beta=1}^n g_{\alpha\beta} \dot{\gamma}^{(\beta)}, \quad \dot{\gamma}^{(\alpha)} > 0 \quad (\text{Ec. 2.70})$$

Donde

$$g_{\alpha\beta} = h_{\alpha\beta} + \lambda^{(\alpha)} : P^{(\beta)} = h_{\alpha\beta} + P^{(\alpha)} : L : P^{(\beta)} + \beta^{(\alpha)} : P^{(\beta)} \quad (\text{Ec. 2.71})$$



En términos de índices materiales de tensión  $\tau^\nabla$ , Ec (2.67) y (2.68), se pueden también escribir como

$$\mu^{(\alpha)} : \tau^\nabla > \sum_R k_{\alpha\beta} \dot{\gamma}^{(\beta)}, \quad \dot{\gamma}^{(\alpha)} = 0 \quad (\text{Ec. 2.72})$$

$$\mu^{(\alpha)} : \tau^\nabla = \sum_B k_{\alpha\beta} \dot{\gamma}^{(\beta)}, \quad \dot{\gamma}^{(\alpha)} > 0 \quad (\text{Ec. 2.73})$$

Donde

$$k_{\alpha\beta} = h_{\alpha\beta} - \mu^{(\alpha)} : \beta^{(\beta)} = h_{\alpha\beta} - P^{(\alpha)} : \beta^{(\beta)} - \beta^{(\alpha)} : L^{-1} : \beta^{(\beta)} \quad (\text{Ec. 2.74})$$

Los módulos de endurecimiento  $g$  y  $k$  fueron introducidos en este contexto por Hill y Rice (1972). Si Ec(2.69) y (2.70) eran únicamente invertibles con  $D$ , o Ec (2.72) y (2.73), invertibles con  $\tau^\nabla$ , el  $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$  podía ser computado y ser substituido en Ec. (2.57) o (2.58), respectivamente.

Condiciones suficientes para la especificación única del  $\dot{\gamma}$  's han sido derivados por Hill y Rice (1972) y aquí enumeramos solamente su resultado. Los  $\dot{\gamma}$  'son únicos con deformaciones prescritas si  $g$  es definido positivo; los  $\dot{\gamma}$  's 'son únicos con deformaciones prescritas  $\tau^\nabla$  si  $k$  es definido positivo. Si  $g$  es definido positivo,  $g^{-1}$  existe, y, por ejemplo, con  $D$  prescrita,

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)} = \sum_{\beta=1}^n g_{\alpha\beta}^{-1} \lambda^{(\beta)} : D \quad (\text{Ec. 2.75})$$

y

$$\tau^\nabla = C : D \quad (\text{Ec. 2.76})$$

con

$$C = L - \sum_{\alpha=1}^n \sum_{\beta=1}^n \lambda^{(\alpha)} g_{\alpha\beta}^{-1} \lambda^{(\beta)} \quad (\text{Ec. 2.77})$$

La unicidad, sin embargo, no está garantizada generalmente, y por lo tanto tampoco es la rotación relativa del mallado con respecto al material: Las condiciones que garantizan unicidad dependen sensiblemente de los índices de endurecimiento, del estado de la tensión (especialmente con respecto al mallado), y de los número y orientación relativa de los sistemas activos. Las condiciones generales no se derivan aquí, puesto que serían incómodas y no instructivas, pero puesto que la pregunta es importante, una breve discusión sigue.



Para la ilustración tomamos la elasticidad del mallado como isotópica linear; G es el módulo elástico. En la formación de los elementos de g y de k observamos eso

$$P^{(\alpha)} : L : P^{(\beta)} = 2GP^{(\alpha)} : P^{(\beta)} \quad (\text{Ec. 2.78})$$

Donde los elementos de g son

$$g_{\alpha\beta} = \underbrace{h_{\alpha\beta} + \beta^{(\alpha)} : P^{(\beta)}}_{g^h} + \underbrace{2GP^{(\alpha)} : P^{(\beta)}}_{g^e} \quad (\text{Ec. 2.79})$$

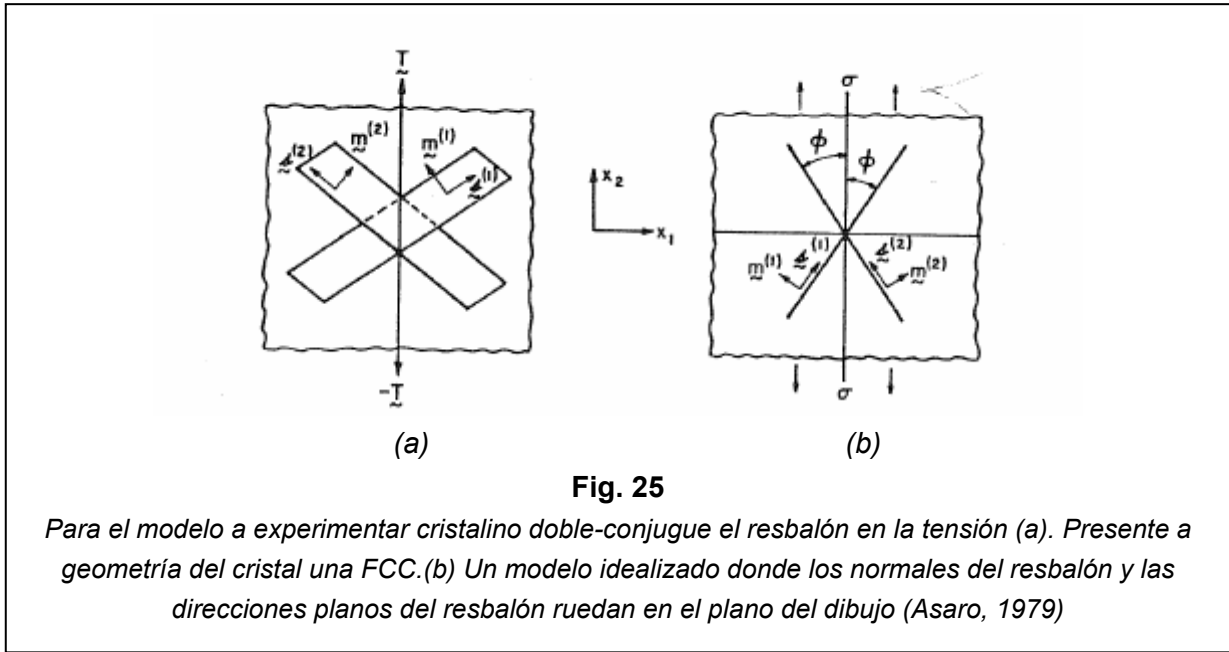
Desde  $P^{(\alpha)} : P^{(\beta)} = \frac{1}{2}$  cuando  $\alpha=\beta$  y es no más de  $1/3$  cuando  $\alpha \neq \beta$  por lo menos para los cristales fcc, la matriz  $g^e$  puede ser definida positiva mientras el número de los sistemas del deslizamiento incluidos (es decir., potencialmente activos) no excede de 5. Si  $n > 5$ , los  $P^{(\alpha)}$  no están linealmente independientes y  $g^e$  llega a ser singular. La matriz  $g^h$  dependa del estado de la tensión resuelto en el mallado a través de los  $\beta$  y en los índices de endurecimiento de los planos de deslizamiento  $h_{\alpha\beta}$ . El últimos tiende a ser definidos negativo, desde entonces  $h_{\alpha\beta} > h_{\alpha\alpha}$ . Los términos restantes adentro de  $g^h$  dependen del estado resuelto de la tensión de cortadura, pero en general contamos con  $|g^h_{\alpha\beta}| \ll |g^e_{\alpha\beta}|$ . Así cuando  $n \leq 5$  y el sistema del incluido es linear independiente (tres sistemas coplanarios en cristal de la fcc no son independientes), luego, g casi se asegura para ser definido positivo en virtud de la componente  $g^e$ . Es mucho más difícil hacer una declaración general con respecto a k, salvo que puesto que no contiene ningún análogo a  $g^e$ , la determinación positiva es más difícil de anticipar.

Consideramos Fig. 25, qué muestra un solo cristal fcc orientado para deslizamiento doble en tensión. Fig. 25a muestra la geometría real y el eje de tensión en alguna parte a lo largo de límite de la simetría.  $\langle 111 \rangle - \langle 100 \rangle$ . Fig. 25b muestra una versión plana idealizada de este cristal. El estado de la tensión con respecto al marco del laboratorio es uno de tensión simple a lo largo del  $x_2$  eje. Para el cristal modelo

$$g_{\alpha\beta} = h_{\alpha\beta} - \sigma/2 \cos 2\varphi + G, \quad \alpha = \beta \quad (\text{Ec. 2.80})$$

$$g_{\alpha\beta} = h_{\alpha\beta} + \sigma/2 \cos 2\varphi - G \cos 4\varphi, \quad \alpha \neq \beta \quad (\text{Ec. 2.81})$$





Y

$$k_{\alpha\beta} = h_{\alpha\beta} + \sigma/2 \cos 2\varphi + O(\sigma^2/G), \quad \alpha = \beta \quad (\text{Ec. 2.82})$$

$$k_{\alpha\beta} = h_{\alpha\beta} - \sigma/2 \cos 2\varphi + O(\sigma^2/G), \quad \alpha \neq \beta \quad (\text{Ec. 2.83})$$

Para este caso asumimos tácito que  $\sigma/G \ll 1$ . El valor de estos componentes para la geometría actual es muy similar si el  $\varphi$  se fija igual a  $30^\circ$ ; de hecho, si  $T \parallel \langle 211 \rangle$ , los únicos cambios requeridos son sustituir  $\sigma/2 \cos 2\varphi$  in Ec(2.80) y (2.81) con 0.264, junto con un cambio similar en el ultimo término en Ec(2.81). Ahora si el modelo se aplica a un cristal fcc donde  $\varphi = 30^\circ$  y  $\cos 4\varphi = -0.5$ , entonces  $g$  es definido positivo mientras que  $\sigma$  y los  $h_{\alpha\beta}$  sean mucho más pequeño en magnitud que el  $G$ . Éste es el caso para la mayoría de los valores de  $\varphi$ . Sin embargo, una situación notable pero muy especial es donde  $\varphi = 45^\circ$  y  $\cos 4\varphi = -1$ , en este caso  $g_{11} = h_{11} + G$ ,  $g_{22} = h_{22} + G$ ,  $g_{12} = h_{12} + G$ , y  $g_{21} = h_{21} + G$ . Si tomamos como ejemplo  $h_{11} = h_{22} = h$ , y  $h_{12} = h_{21} = h$ , como la simetría ortotrópica del modelo pudo implicarlo, luego la determinación positiva depende de  $h > h_1$ , que es eliminado con eficacia por las estimaciones experimentales de endurecimiento latente. La situación de  $k$  es mucho más difícil para concluir en general. Por ejemplo, si tomamos otra vez  $h_{11} = h_{22} = h$ , y  $h_{12} = h_{21} = h$ , y descuidemos los términos del orden  $\sigma^2/2$ , entonces,  $k$  es definida positivo si y solamente

$$\cos 2\varphi > (h/\sigma)(q-1), \quad q \equiv h_1/h \quad (\text{Ec. 2.84})$$

o

$$h - h_1 + \sigma \cos 2\varphi > 0 \quad (\text{Ec. 2.85})$$



Como lo observamos anteriormente, se espera que  $q$  sea en la gama  $1 \leq q \leq 1.4$ , y si el modelo debe representar un cristal fcc tensión,  $\phi \approx 30^\circ$ . Estas dos especificaciones requieren eso para la desigualdad en Ec(2.84) y (2.85), para sostener  $h/\sigma < 1.25$ , o desde  $\sigma \approx 2.3\tau$ , donde  $\tau$  es la tensión de cortadura resuelta en cualquier sistema,  $h/\tau < 2.875$ . El número de los casos donde esta desigualdad fallaría para los cristales verdaderos del metal es legión - la falta sería común, por ejemplo en la deformación plástica inicial y durante la deformación inmediatamente subsiguiente de 1 o del 2% en cristales de aleación de aluminio, según lo discutió Peirce y otros (1982). Después de tensiones de 1 o el 2%,  $h/\tau$  caería debajo de 2 o de 3, asegurando que Ec(2.84) y (2.85), está satisfecha.

La importancia de endurecimiento latente con respecto a la unicidad del modo del deslizamiento se hace claramente en el ejemplo anterior, desde entonces si  $q < 1$ , la unicidad en el modo de deslizamiento se asegura mientras  $\cos 2\phi > 0$ . Sin embargo, el punto principal es que las leyes que no dependen del índice de endurecimiento tampoco conducirán a un modo de deslizamiento único generalmente y especialmente cuando las descripciones físicamente realistas de endurecimiento latente son incluidas. Si un modo único de deslizamiento se debe exigir en los argumentos físicos es otro tema que debe de ser evaluado viendo la actual dependencia del índice del deslizamiento y tales fenómenos como “deslizamiento irregular”

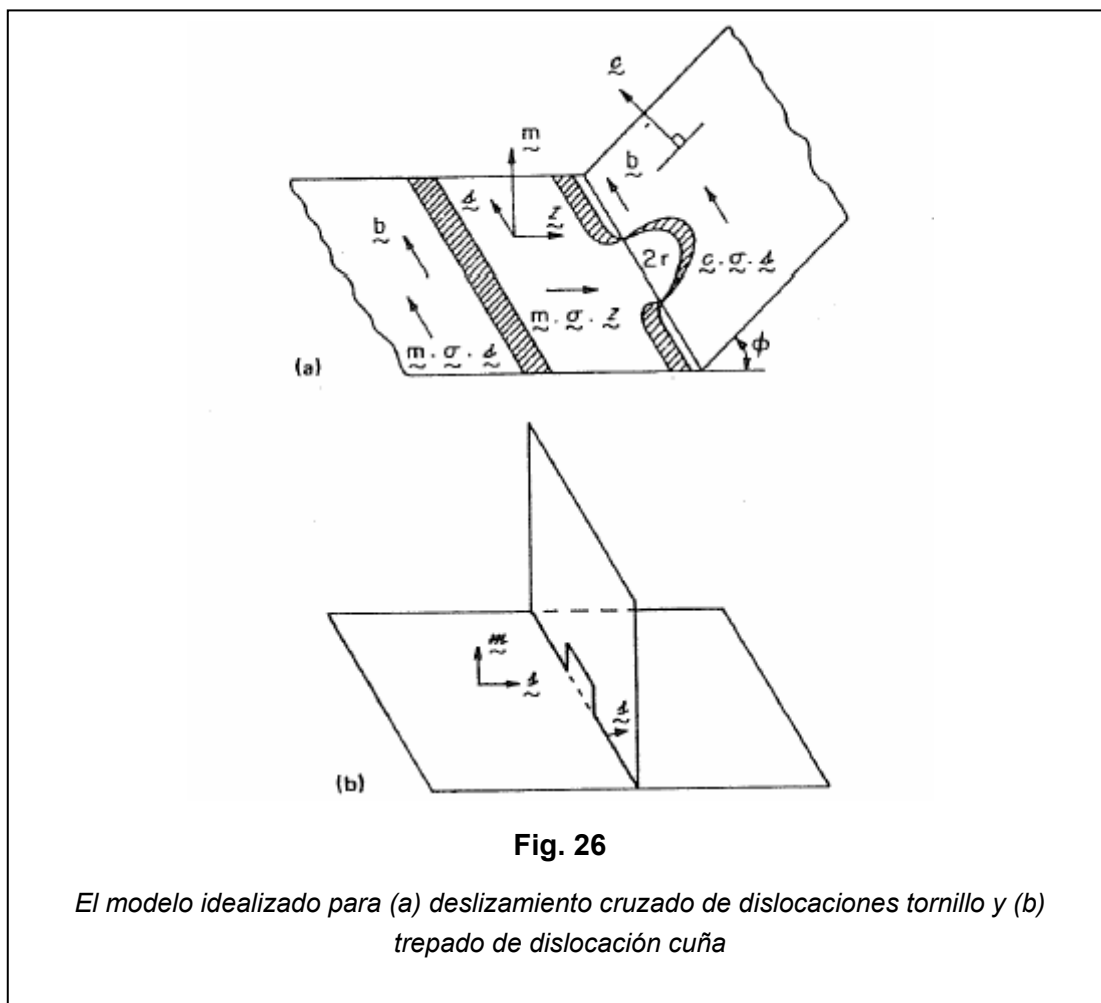
#### **2.3.3.5. Desviación de la ley de Schmid y de la normalidad plástica en deslizamiento simple**

Las desviaciones de la ley de Schmid se presentan cada vez que  $\tau_c^{(a)}$  en Ec( 3.62) y (2.63), se interpreta de otro modo que como la tensión de Schmid  $\tau^{(a)}$  definido en Ec(2.50) . Esto ha sido discutido por Asaro y Rice (1977) particularmente, quién ilustró que otras definiciones de  $\tau_c$  se generan, dependiendo de cómo el  $\mathbf{s}$  y  $\mathbf{m}$  se elige para circular y rotar con la malla; las relaciones (2.30) y (2.31) son solamente una opción posible.

Desde que todas las definiciones físicamente apropiadas obligan a  $\mathbf{s}$  que permanezca en el plano de deslizamiento (y rotar así con la malla), las diferencias en las varias opciones para los  $\dot{\gamma}$  son del orden de los índices elásticos de la deformación y son así generalmente insignificante, como se muestra abajo. Por otra parte, las desviaciones de la ley de Schmid son inherentes en la micro mecánica del deslizamiento de la dislocación sí misma, sin importar cómo el  $\tau$  se relaciona con la elasticidad de la malla. Por ejemplo se considere la Fig. 26 que muestra el modelo idealizado de deslizamiento desviado de una dislocación tornillo y de un “trepado” de una dislocación cuña. En ambos casos estos procesos micro mecánicos localizados representan los medios para que las dislocaciones superen obstáculos a su movimiento continuado.







**Fig. 26**

*El modelo idealizado para (a) deslizamiento cruzado de dislocaciones tornillo y (b) trepado de dislocación cuña*

En ambos casos los acontecimientos críticos son influenciados por componentes de tensión otros que la tensión de Schmid  $\tau_{ms}$ .

En el proceso de deslizamiento cruzado la dislocación extendida debe de primeramente encogerse sobre un segmento seguido por una cantidad crítica de inclinación del plano de deslizamiento cruzado. La constricción es influenciada por la tensión de cortadura  $\tau_{ms}$ , mientras que el proceso de la inclinación es conducido parcialmente por  $\tau_{cs}$  que tiene un componente que viene de  $\tau_{zs}$ . En simple deslizamiento esto conduce a una ley del fluencia del tipo

$$\dot{\gamma}_{ms} = \frac{1}{h} (\dot{\epsilon}_{ms} + \alpha \dot{\epsilon}_{zs} + \beta \dot{\epsilon}_{mz}) \quad (\text{Ec. 2.86})$$

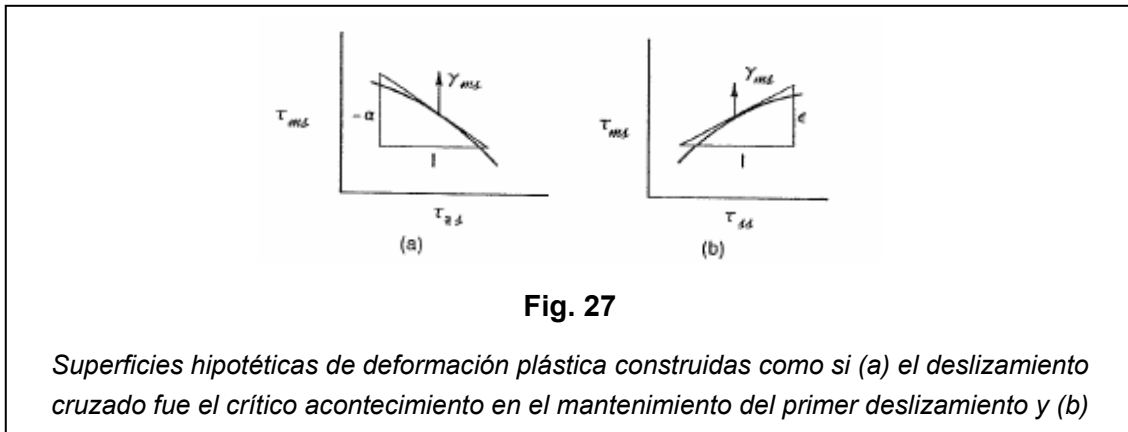
donde  $h$  es el índice de endurecimiento por deformación del sistema actual (s,m). Aquí  $\alpha$  y  $\beta$  por ejemplo, dan el decremento en la tensión de Schmid  $\tau_{ms}$ , que concurda con el mantenimiento de la deformación plástica, por unidad aumentan en tensiones, otras que tensiones de Schmid,  $\tau_{zs}$  y  $\tau_{mz}$ . El proceso de trepado para el segmento cuña



mostrado en Fig.26b es, por otra parte, influenciado por la tensión normal  $\tau_{ss}$  que, causa una fuerza de trepada en un plano ortogonal al vector de Burgers (es decir  $\mathbf{s}$ ) y que contiene la línea de dislocación. Una ley de fluencia incluyendo este efecto tendría la forma

$$\dot{\gamma}_{ms} = \frac{1}{h} (\tau_{ms} - \varepsilon \tau_{ss}) \quad (\text{Ec. 2.87})$$

En una sección del espacio de los tensiones resuelto en el mallado, las superficies de deformación plástica relacionadas podrían entonces parecer como lo esta representado en Fig.27, que también ilustra la non-normalidad del incremento plástico de la deformación. La normalidad sería restaurada en el ejemplo de Ec(2.86)y Fig 26a del si las relaciones del tipo  $d\gamma_{zs} = \alpha d\gamma_{ms}$  and  $d\gamma_{mz} = \beta d\gamma_{ms}$  se quedan. Éste es muy improbable en general y analizando el fenómeno de deslizamiento simple en el sistema (s,m) es razonable tomar  $d\gamma_{zs} = d\gamma_{ms} = 0$ . Esperamos que los parámetros,  $\beta$ , o  $\varepsilon$  a sean perceptiblemente menos que 1, pero las medidas directas de estos efectos ( non-Schmid) se limitan actualmente



Para incorporar los efectos “non-Schmid” dentro de una ley de fluencia de cristal del tipo dado anteriormente en Ec (2.67) y (2.68) , es necesario relacionar todos los  $\dot{\tau}$  , en las relaciones como en Ec (2.86) y (2.87), con  $\dot{\tau}^{\nabla*}$  . Sin embargo, conociendo las incertidumbres en las magnitudes de estos efectos, es difícil hacer eso con precisión. Además, parece prudente adoptar de nuevo el simple enfoque originalmente sugerido por Asaro y Rice(1977).

Para comenzar, recordamos eso cuando el  $\tau$  se define según lo en Ec(2.50) con P dado por Ec(2.38),  $\dot{\tau}_{ms}$  es dado por Ec (2.61),

$$\dot{\tau}_{ms} = m^{*(\alpha)} \cdot (\tau^{\nabla*} - D^* \cdot \tau + \tau \cdot D^*) \cdot s^{*(\alpha)} \quad (\text{Ec. 2.88})$$

Si por claridad ahora tomamos el estado actual de la deformación coincidente con el estado de referencia indique,  $\tau = \sigma$ ,  $s = s^*$ ,  $m = m^*$ , y  $\tau_{ms} = m \cdot \sigma \cdot s$



Si  $\tau$  es la tensión de Schmid definida por Ec(2.50) con  $P$  definido por Ec(2.38), entonces observamos eso

$$\dot{s} = (D^* + \Omega^*) \cdot s \quad (\text{Ec. 2.89})$$

y

$$\dot{m} = -m \cdot (D^* + \Omega^*) + m \cdot \text{tr}(D^*) \quad (\text{Ec. 2.90})$$

y que

$$\dot{\tau}_{ms} = m \cdot [\sigma^{\nabla*} + \sigma \cdot \text{tr}(D^*) - (D^*) \cdot \sigma + \sigma \cdot D^*] \cdot s \quad (\text{Ec. 2.91})$$

Esto es equivalente a Ec(2.88) desde entonces  $\tau^{\nabla*} = \sigma^{\nabla*} + \sigma \cdot \text{tr}(D)$  con la referencia así elegida. Sin embargo, otra definición de  $\tau$  y  $\dot{\tau}$  resulta si en:  $\tau_{ms} = m \cdot \sigma \cdot s$ ,  $s$  y  $m$  siguen siendo los vectores ortogonales unitarios que rotan con el mallado de modo que  $s$  siga siendo en el plano de deslizamiento. Entonces

$$\dot{s} = (D^* + \Omega^*) \cdot s - s(s \cdot D^* \cdot s) \quad (\text{Ec. 2.92})$$

$$\dot{m} = -m \cdot (D^* + \Omega^*) + m(m \cdot D^* \cdot m) \quad (\text{Ec. 2.93})$$

y

$$\dot{\tau}_{ms} = m \cdot [\sigma^{\nabla*} - D^* \cdot \sigma + \sigma \cdot D^* + \sigma(m \cdot D^* \cdot m - s \cdot D^* \cdot s)] \cdot s \quad (\text{Ec. 2.94})$$

Un tercer definición resulta tomando  $s$  y  $m$  en:  $\tau_{ms} = m \cdot \sigma \cdot s$ , como vectores ortogonales unitarios que rotan simplemente con el índice de velocidad de rotación del mallado  $\Omega^*$ . Entonces

$$\dot{m} = \Omega^* \cdot m \quad (\text{Ec. 2.95})$$

$$\dot{s} = \Omega^* \cdot s \quad (\text{Ec. 2.96})$$

y

$$\dot{\tau}_{ms} = m \cdot \sigma^{\nabla*} \cdot s \quad (\text{Ec. 2.97})$$

Como Asaro y Rice (1977) lo han demostrado, todas tales interpretaciones de la tensión de cortadura resuelta conducen a  $\dot{\tau}$  de la forma

$$\dot{\tau}_{ms} = m \cdot [\sigma^{\nabla*} + \sigma \cdot \text{tr}(D^*)] \cdot s + \sigma : H : D^* = m \cdot \sigma^{\nabla*} \cdot s + \sigma : H : D^* \quad (\text{Ec. 2.98})$$



donde H esta un tensor 4\*4 con los elementos de O(1) que depende de la manera exacta con la cual los vectores **s** y **m** se deforme con el mallado. Invirtiendo Ec (2.42), Ec(2.98) se puede también escribir de la forma

$$\dot{\tau}_{ms} = (\mathbf{s}\mathbf{m} + \sigma : \mathbf{H} : \mathbf{L}^{-1}) : \tau^{\nabla*} = (\mathbf{P} + \sigma : \mathbf{H} : \mathbf{L}^{-1}) : \tau^{\nabla*} \quad (\text{Ec. 2.99})$$

Esto ilustra el punto visto anteriormente, que mientras el vector **s** se elija para rotar con el mallado, o permanecer preferiblemente en el plano de deslizamiento moviendo con el mallado, los varios  $\dot{\tau}$  se diferencien solamente por términos de  $O(\sigma/L)$ , cuáles son típicamente insignificantes. En efecto la verificación experimental de la regla de Schmid, no es conocida con una precisión que implica términos de esta orden

Debido a esto, se parece enteramente adecuado escribir la expresión para  $\dot{\tau}_{mz}, \dot{\tau}_{zs}$ , etc., en leyes como Ec(2.86) del tipo  $\mathbf{m} \cdot \tau^{\nabla*} \cdot \mathbf{z}$ ,  $\mathbf{z} \cdot \tau^{\nabla*} \cdot \mathbf{s}$ , etc., y entonces escribir una ley de fluencia más general que incorpora los efectos “non-Schmid” de la forma

$$\dot{\gamma}_{ms} = \frac{1}{h} \mathbf{Q} : \tau^{\nabla*} \quad (\text{Ec. 2.100})$$

donde

$$\mathbf{Q} = \mathbf{P} + \sigma : \mathbf{H} : \mathbf{L}^{-1} + \alpha \quad (\text{Ec. 2.101})$$

y

$$\alpha = \begin{bmatrix} \alpha_{ss} & 0 & \alpha_{sz} \\ 0 & \alpha_{mm} & \alpha_{mz} \\ \alpha_{sz} & \alpha_{mz} & \alpha_{zz} \end{bmatrix} \quad (\text{Ec. 2.102})$$

Por otra parte, cuando la tensión de Schmid de Ec(2.50) se utiliza otra vez, Ec(2.100) se podría escribir alternativamente como

$$\dot{\gamma}_{ms} = \frac{1}{h} (\mu + \alpha) : \tau^{\nabla*} \quad (\text{Ec. 2.103})$$

en todo caso, aparte de los efectos probablemente insignificantes de la elasticidad del mallado, por ejemplo  $\alpha_{zs} = \alpha_{sz} = \alpha/2$  y  $\alpha_{zm} = \alpha_{mz} = \beta/2$  en Ec(2.86) y  $\alpha_{ss} = -\epsilon$  en Ec(2.87)



### 2.3.3.6. leyes de fluencia que dependen del índice de deformación

En la sección precedente fue observado que la resistencia al movimiento de la dislocación, y por lo tanto la tensión de cizalladura de un sistema del deslizamiento, depende de la existencia de obstáculos al movimiento de la dislocación. Impurezas, intersecciones de tipo “bosque”, partículas o precipitados de segunda fase, cerraduras de Lomer, etc..., son los ejemplos de tales barreras. También fue observado que los obstáculos son superados por micro mecanismos tales como deslizamiento desviado y trepado, entre otros, eso requiere que las dislocaciones deslizen para alcanzar un estado crítico de energía libre más alto. El trabajo reversible requerido para alcanzar este estado fue llamado  $\Delta G$ . Cuando la deformación plástica es idealizada como insensible al índice, las tensiones locales aplicadas se presumen suficientes para conducir  $\Delta G$  a un valor igual a 0 para superar los obstáculos en una manera puramente mecánica. A índices de inferiores a  $10^3$  o así, pues, sin embargo, las fluctuaciones termal proveen una parte de  $\Delta G$  de modo que el movimiento de la dislocación y la deformación a un índice finito ocurran a tensión debajo del umbral mecánico. En el ámbito de teoría del estado de la transición (véase por ejemplo, Krausz y Eyring, 1975) la probabilidad que en una región, aparezca una fluctuación termal críticamente grande se toma para ser proporcional a

$$e^{-\Delta G / kT}$$

donde  $k$  es la constante de Boltzmann y  $T$  es la temperatura absoluta. El índice al cual la dislocación supera los obstáculos entonces se da por

$$\nu e^{-\Delta G / kT}$$

Donde  $\nu$  es una “frecuencia característica” a la cual tentativas se hacen para alcanzar el crítico estado. Esta última declaración es, por supuesto, altamente idealizado ya que  $\nu$  representa, evidentemente, debe pertenecer a una clase de frecuencia media, lo que es fuertemente dependiente de los detalles del estado de la transición (es decir, el arreglo de las dislocaciones), que sucesivamente cambia con la deformación. Cuando la velocidad media  $\nu$  de la dislocación es determinada por esta clase de “aflojamiento termal” de obstáculos, en comparación con el índice al cual las dislocaciones se deslizen entre los obstáculos por ejemplo,  $\nu$  se puede expresar como

$$\bar{l} \nu e^{-\Delta G / kT}$$

donde  $\bar{l}$  es un espaciado medio entre los obstáculos. Entonces  $\nu$  depende muy sensiblemente del estado de la tensión vía  $\Delta G$  y también de la temperatura  $T$ . Como lo hemos discutido antes,  $\Delta G$  depende en general de la tensión de cortadura resuelta  $\tau$ , que actúa en el sistema de deslizamiento, así como otros componentes de la tensión.



En la discusión a seguir, sin embargo, no tenemos en cuenta los efectos “non-Schmid”.

Observamos que las medidas experimentales, midan la respuesta macroscópica de un sistema de deslizamiento a las tensiones aplicadas que implican el movimiento de muchas dislocaciones. Esto se analiza generalmente usando la relación de Orowan (Ec 2.15). Para un estado dislocado dado del cristal debe asumir que  $\rho_m$  también depende de la tensión. Ahora para caracterizar la sensibilidad del material (y de su estructura interna actual) al índice de la deformación se define el parámetro  $m$  como

$$m \equiv \frac{\partial \ln \dot{\gamma}}{\partial \ln \tau} \approx \frac{\partial \ln \rho_m}{\partial \ln \tau} + \frac{\partial \ln v}{\partial \ln \tau} \quad (\text{Ec. 2.104})$$

donde el segundo término se puede expresar como

$$\frac{\partial \ln \rho_m}{\partial \ln \tau} = \frac{\partial \ln(v\bar{l})}{\partial \ln \tau} - \frac{\tau}{kT} \frac{\partial \Delta G}{\partial \tau} = \frac{\partial \ln(v\bar{l})}{\partial \ln \tau} + \frac{\tau v^*}{kT} \quad (\text{Ec. 2.105})$$

La magnitud de  $m$  es influenciada fuertemente (entre otras cosas) por la dependencia a la tensión de  $\Delta G$ ; cuando es grande, también  $m$  lo es, y el material muestra una sensibilidad relativamente baja al índice. Esencialmente, esto viene de que  $v^*$ , que tiene la dimensión de un volumen y se llama el “volumen de la activación”, es efectivamente el volumen a través del que la tensión generalizada  $t$  actúa afectando (disminuyendo)  $\Delta G$ . Cuando  $v^*$  es grande, es decir cuando  $\Delta G$  es fuertemente dependiente de la tensión, el estado de la transición debe ser casi superado mecánicamente antes de que las fluctuaciones térmicas lleguen a ser importantes. Krausz y Eyring (1975) enumeraron algunos valores aproximados para  $v^*$  correspondiendo a mecanismos comunes de la dislocación

Trepado	$v^* = 1b^3$
Deslizamiento cruzado	$v^* = 10^{-10^2} b^3$
Unión de la dislocación	$v^* = 10^2 - 10^4 b^3$

Byrne y otros (1961), como otro ejemplo, midieron  $v^*$  en la gama  $10^2 - 10^3 b^3$  en aleaciones del aluminio-cobre endurecidos por precipitación, donde las dislocaciones deben “cortar a través” los precipitados. Cuando  $v^*$  es de este orden de valores, la sensibilidad al índice y la dependencia correspondiente a la temperatura de la deformación plástica son relativamente pequeñas. Generalmente observamos que  $m$  dependerá de la estructura interna y debe de cambiar con la deformación plástica. Como un ejemplo específico, algunos resultados experimentales recientes sobre el efecto del índice de deformación en cristales del aluminio son discutidos. El resultado, tomado del trabajo de Chiem y de Duffy (1981), utilizó nuevas técnicas experimentales



que permiten determinaciones precisas de las relaciones con  $\tau$  arreglo a  $\gamma$  con índices de deformación tan grandes como  $2 \cdot 10^3 \text{ sec}^{-1}$ .

La Fig. 28 ilustra  $\tau$  con arreglo a  $\gamma$  sobre la gama de las índices de deformación  $4 \cdot 10^{-5}$  -  $1.6 \cdot 10^3 \text{ sec}^{-1}$ . Los datos indican ambos una influencia del índice de deformación sobre el nivel de la tensión de plastificación así como sobre el índice de endurecimiento por deformación. Fig. 29 muestra la respuesta del material a los cambios repentinos del índice de deformación , para los casos mostrados la deformación fue aumentado de  $5 \cdot 10^4$  hasta  $850 \text{ sec}^{-1}$  después de varias deformaciones efectuadas en el índice más bajo

Chem y Duffy (1981) interpretaron sus resultados usando el análisis del índice termal y los correlacionaron con la subestructura de la dislocación que observaron con microscopia electrónica. Fig. 30 muestra sus resultados para la densidad de dislocación total con arreglo a la deformación de cortadura con el índice de deformación  $5 \cdot 10^{-4} \text{ sec}^{-1}$ . Con índices casi estáticas, las células de dislocaciones bien definidas se formaron, y la relación entre el tamaño medio de célula y la resistencia a la fluencia se demuestra en Fig. 31. La forma analítica para eso es

$$\rho_{\text{total}} = 2.7 \cdot 10^8 + 1.15 \cdot 10^{10} \gamma_s \text{ cm}^{-2}$$

(Ec. 2.106)

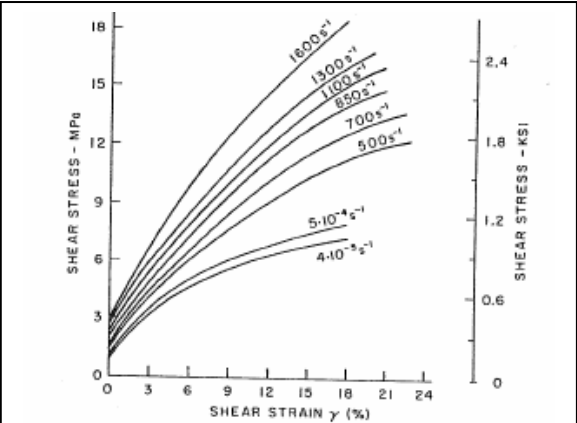


Fig. 28

Tensión de esqueleo resuelta contra las curvas de la tensión del esqueleo obtenidas en las tarifas constantes, tarifas que se extienden de  $4 \cdot 10^{-5}$  hasta  $1.6 \cdot 10^{-3} \text{ s}^{-1}$  en  $20^\circ\text{C}$ (Chiem and Duffy, 1981)

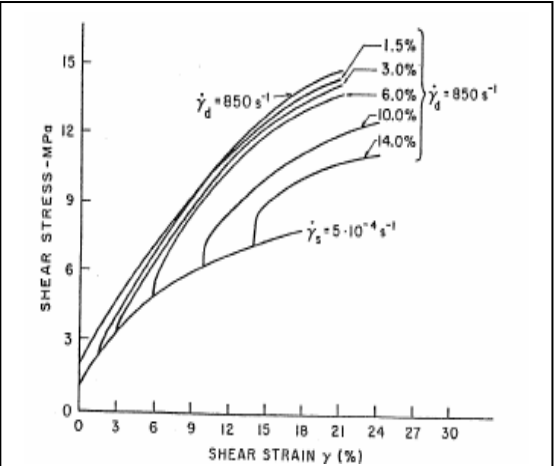
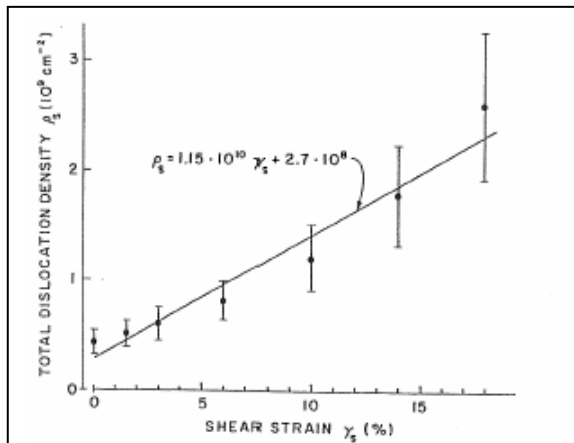


Fig. 29

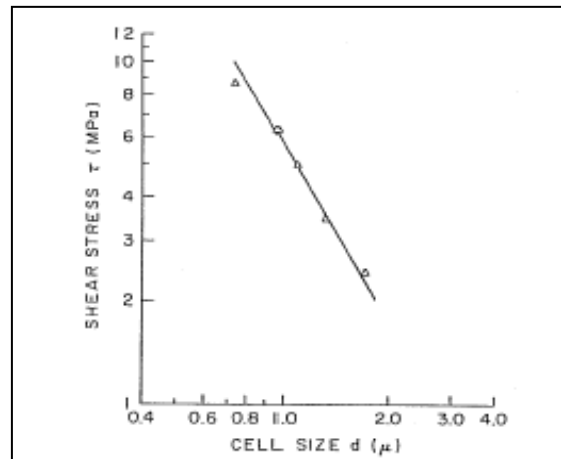
La tarifa "salto" de la tensión prueba por la rapidez que aumenta la tarifa de la tensión después de varios preextraías en  $20^\circ\text{C}$  (Chiem y Duffy, 1981)





**Fig. 30**

*Dislocations density versus shear strain following quasi-static deformation at strain rate  $5 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}$  at  $20^\circ\text{C}$  (Chiem and Duffy,*



**Fig. 31**

*Relation between flow strength and dislocation cell diameter at  $20^\circ\text{C}$  (Chiem and Duffy, 1981)*

y

$$\tau = 7.45 d^{-1} - 1.84 \quad (\text{Ec. 2.107})$$

Chiem y Duffy(1981) observaron, sin embargo, que una forma dimensional de Hall-Petch

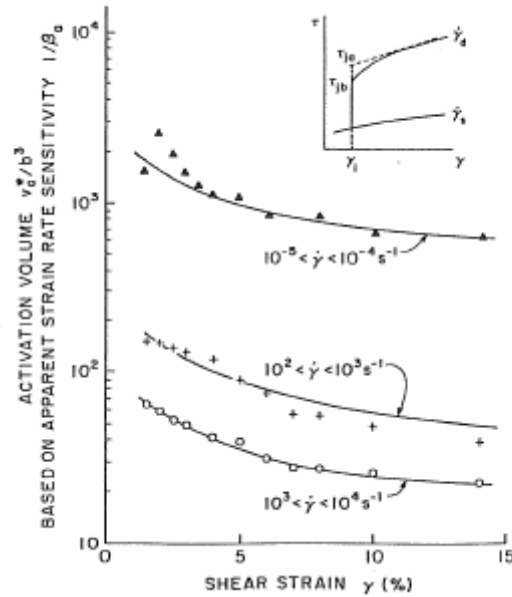
$$\tau = 14.66 d^{1/2} - 8.92 \quad (\text{Ec. 2.108})$$

también sirve en la relación  $\tau$  con arreglo a  $d$  con casi la misma precisión. Divulgaron que las células formadas en los índices de deformación más altas y que eran más pequeños en diámetro, de acuerdo con las resistencias más altas. Varios parámetros importantes que actúan en el análisis termal fueron computados, a saber,  $m$  y  $v^*$  definidos previamente, y las cantidades  $\beta$  y  $v^*$  definidas como

$$\beta \equiv \left( \frac{\partial \ln \dot{\gamma}}{\partial \tau} \right)_{T, \rho} \quad y \quad v^* \equiv - \left( \frac{\partial \Delta G}{\partial \tau} \right)_{T, \rho} \quad (\text{Ec. 2.109})$$







**Fig. 32**

*Volumen evidente de la activación  $v_a^*$  contra la tensión del esqueleo en 20°C  
(Chiem y Duffy, 1981)*

Las dos derivadas que definen  $\beta$  y  $v^*$  se utilizan en principio para “estructura interna” fija es decir, para una densidad fija y una configuración local de la dislocación. Prácticamente a menudo que las derivadas en Ec(2.105) y (2.106),  $\partial \ln \rho_m / \partial \ln \tau$  y  $\partial \ln(v\bar{l}) / \partial \ln \tau$ , son pequeños con respecto a las que implican  $\Delta G$  y  $v$ . En este caso hay una relación simple entre  $\beta$ ,  $v^*$ , y  $m$ :

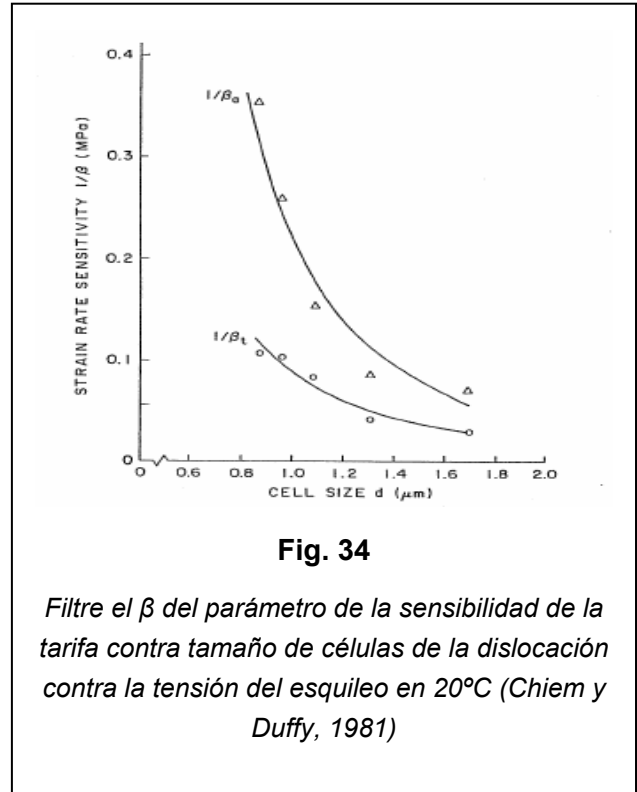
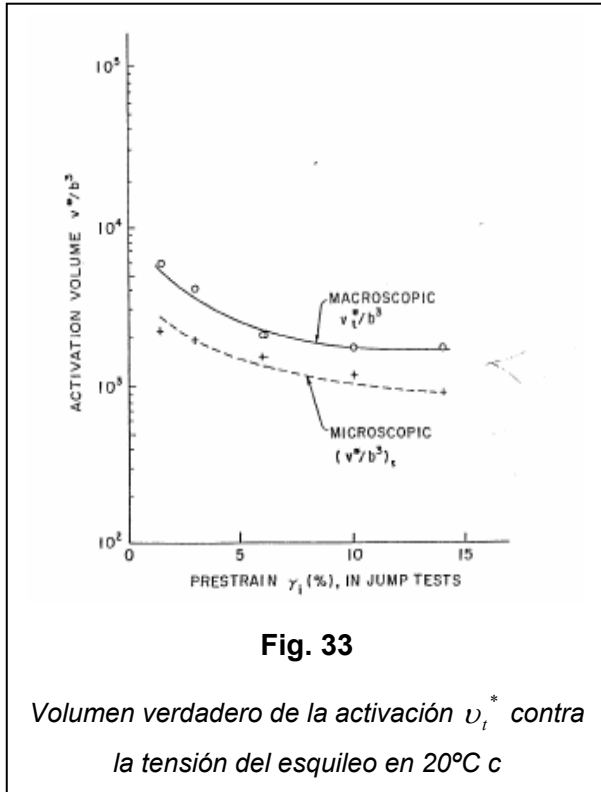
$$m \approx \beta \tau \approx v^* \tau / (kT) \quad (\text{Ec. 2.110})$$

Cuando  $m$ ,  $\beta$ , y  $v^*$  se evalúan desde los datos del índice de deformación (Fig. 28), son llamadas valores “evidentes”; cuando se evalúan del salto del índice de deformación (Fig. 29), se llaman los valores “verdaderas”. Estos valores se señalan con los subíndices “a” y “t” respectivamente.

Valores para  $v_a^*$  como función de la deformación de cizalladura se muestran en Fig. 32. Los resultados de  $v_t^*$  computados desde los datos de Fig.29 se muestran en Fig.33. Es evidente que  $v^*$  depende ambos de la deformación y del índice de deformación. Semejantemente, el parámetro de la sensibilidad al índice de deformación,  $\beta$ , computado con el índice de deformación  $5 \cdot 10^{-4} \text{ sec}^{-1}$  se muestra Fig. 34; el  $\beta$  es definido en Ec(2.109) y (2.110) y, como se muestra en el diagrama de Chiem y Duffy, depende de la subestructura de la dislocación y por lo tanto de la



deformación. Cuando se computa  $m$  de la Ec (2.10), usando Fig.31 y 34, varia en la gama 70-100. Es interesante de notar que cuando  $m$  se computa usando los valores “evidentes” del  $\beta$  derivadas de los valores del índice de deformación constante, aparece como dos a tres veces más grande. Chiem y Duffy (1981) han demostrado más detalladamente que el parámetro de la sensibilidad al índice de la deformación  $m$  tiende a disminuir con índices de deformación más grandes. Sin embargo, para materiales puros fcc como el aluminio  $m$  es relativamente grande, del orden de  $10^2$ , y la respuesta material muestra a menudo una insensibilidad evidente al índice especialmente cuando los índices nominales de deformación pertenecen al régimen casi estático  $10^{-6}$ - $10^{-4}$ sec-1



Los metales bcc(body-centered cubic)tienden a ser más sensitivos al índice  $\beta$  que los fcc. Por ejemplo, Fig. 35 muestra algunos típicos resultados de pruebas sobre el salto del índice de deformación y del parámetro real de sensibilidad al índice  $\beta$  calculado para acero suave ( 0.125 wt.% C, 1.15 wt.% Mn) a 20° C. La fenomenología que sigue los saltos súbitos del índice de deformación es bastante diferente de la de los metales fcc, ya que la tensión de plastificación al índice más grande, salta a valores por encima de las que hubieran predominado si el índice de deformación había sido constante al índice más grande. Con deformación continua después del salto, sin embargo, la tensión de plastificación tiende a subir a valores que corresponden a la curva del endurecimiento por deformación al índice de deformación constante más grande. Aquí  $m$  es más grande para los metales fcc, especialmente en la gama de temperatura 100-300K



Una relación isotérmica simple que cuenta, por parte, en la fenomenología que acabamos de describir, es la forma no lineal:

$$\dot{\gamma} = \dot{a}(\tau / g)^m, \quad (Ec. 2.111)$$

donde el valor de  $g$  es determinada por la estructura interna corriente y  $\dot{a}$  es el parámetro definido para que  $\dot{\gamma} = \dot{a}$  cuando la tensión de cortadura resuelta  $\tau = g$ . El endurecimiento por deformación se explica autorizando  $g$  a cambiar con la deformación, según una ley cinética, posiblemente de la forma

$$\dot{g} = h\dot{\gamma}, \quad (Ec. 2.112)$$

donde  $h$  es elegido para depender de  $\gamma$  (o  $\dot{\gamma}$ ), como lo parece apropiado. La ley constitutiva más arriba, de echo, contiene la ley a menudo utilizada:

$$\sigma = (const)\varepsilon^n \dot{\varepsilon}^{1/m}, \quad (Ec. 2.113)$$

que describela el endurecimiento. Este ley no lineal tiene una generalización simple para el deslizamiento múltiple que fue utilizada por Pan y Rice(1982). Por ejemplo, podemos extender Ec(2.111) para suponer que para cada sistema de deslizamiento

$$\begin{aligned} \dot{\gamma}^{(\alpha)} &= \dot{a}^{(\alpha)} (\tau^{(\alpha)} / g^{(\alpha)})^m, & \tau^{(\alpha)} > 0 \\ \dot{\gamma}^{(\alpha)} &= 0, & \tau^{(\alpha)} \leq 0 \end{aligned} \quad (Ec. 2.114)$$

para que cada  $\dot{\gamma}^{(\alpha)} \geq 0$  y continuamos definiendo sistemas de deslizamiento positivos y negativos. Alternativamente, podemos autorizar ambos positiva y negativa cizalladura sobre los sistemas, en este caso, Ec(2.114) puede escribirse

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)} = \dot{a}^{(\alpha)} |\tau^{(\alpha)} / g^{(\alpha)}|^{m-1} \tau^{(\alpha)} / g^{(\alpha)}, \quad (Ec. 2.115)$$

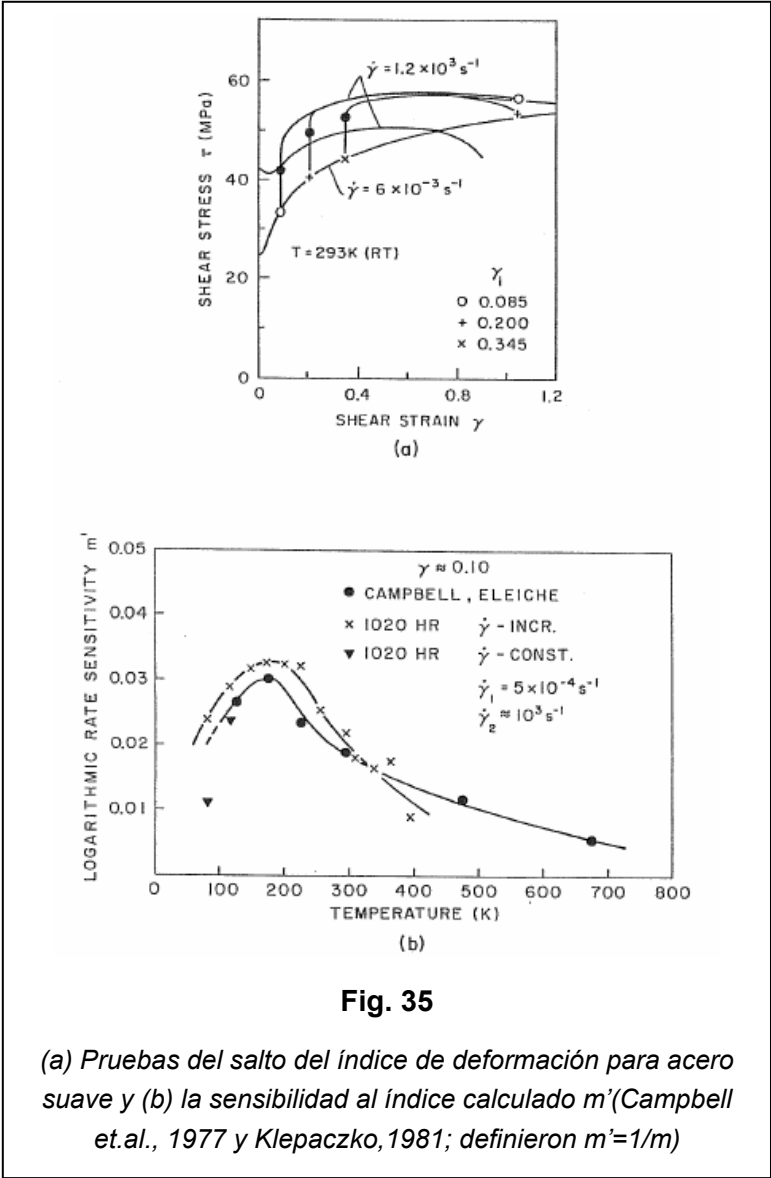
La forma más apropiada dependerá de la característica de la deformación plástica que debe de ser modelada. En cualquier caso, los parámetros de dureza  $g^{(\alpha)}$  son positivos y cambian según

$$\dot{g}^{(\alpha)} = \sum_{\beta} h_{\alpha\beta} |\dot{\gamma}^{(\beta)}|, \quad (Ec. 2.116)$$

para explicar el endurecimiento latente. Una ley constitutiva que no depende de índices resulta si las ecuaciones (2.114), (2.115), (2.116) son utilizadas para calcular el  $\dot{\gamma}$  en la ecuación (2.48). En este caso no hay indeterminación en la elección de los  $\dot{\gamma}$  mientras el corriente valor de  $g^{(\alpha)}$  y  $\tau^{(\alpha)}$  es conocido. En cierto modo todos los sistemas



de deslizamiento son activos, con sus índices de cizalladura calculados por Ec(2.114). Para los materiales insensibles a los índices, es decir aquellos para los cuales  $m > 100$ , el  $g^{(\alpha)}$  será casi igual a las relaciones  $\tau$  con arreglo a  $\gamma$ , medidas durante las deformaciones casi estáticas. No obstante, como lo muestra un análisis del endurecimiento latente, presentada en la sección 3.3.3.7, la descripción de la deformación plástica es todavía bastante diferente.



**2.3.3.7. El módulo de endurecimiento  $h_{\alpha\beta}$**

El endurecimiento latente tiene una influencia vital en la respuesta elástico-plástico de los materiales cristalinos. Cuando la plasticidad se modela como explícitamente insensible al índice, por ejemplo, el endurecimiento latente fuerte puede conducir fácilmente a una pérdida de unicidad en el modo de deslizamiento. Además, como el plano de doble-deslizamiento modelo resuelta en la sección 3.3.4.1 lo ilustra, la gama



de la magnitud relativa del  $h_{\alpha\beta}$  sugerida por el experimento acórchela a menudo el criterio por pérdida de unicidad. Cuando se explica la dependencia del índice, la unicidad puede ser restaurada, con tal que, por supuesto, una descripción bastante completa de los estados actuales del material y de la tensión esté disponible para construir una relación  $\dot{\gamma}$  con arreglo  $\tau^{(\alpha)}$ . Sin embargo, si la deformación en un sistema de deslizamiento tiende a aumentar la dureza en otros sistemas más que en su propio sistema, el deslizamiento múltiple homogéneo es inverosímil y se espera un irregular diseño de deslizamiento. Debido a este papel importante de la  $h_{\alpha\beta}$ , concluimos esta discusión sobre leyes constitutivas previendo más perspectiva en ellas.

Especialmente, se analiza el modelo plano para un cristal sufriendo deformaciones en solo modo principal o doble principal- secundario modo de deslizamiento. El objetivo principal del análisis es calcular la cantidad de rotación de la malla que ocurre cuando el cristal se orienta inicialmente para deslizamiento simple y después sufre el deslizamiento doble, y comparar esto con los resultados experimentales discutidos anteriormente. El modelo usado fue mostrado anteriormente en Fig.23 donde el  $\beta$  ahora es el ángulo con el cual el mallado ha rotado con respecto al eje de tracción fijo a lo largo de  $l$

Para incluir ambos los comportamientos dependientes del índice y esencialmente independiente del índice, del material, la ley del fluencia se toma como en Ec(2.114):

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)} = \dot{a}^{(\alpha)} (\tau^{(\alpha)} / g^{(\alpha)})^m \quad (\text{Ec. 2.114})$$

Dejando  $m \rightarrow \infty$  se acerca el comportamiento independiente del índice. Para un cálculo específico también tomamos  $\dot{g}^{(p)}$  y  $\dot{g}^{(c)}$  para tener la forma de Ec(2.117)

$$\dot{g}^{(p)} = h_{pp} \dot{\gamma}^{(p)} + h_{pc} \dot{\gamma}^{(c)} \quad (\text{Ec. 2.117})$$

$$\dot{g}^{(c)} = h_{cp} \dot{\gamma}^{(p)} + h_{cc} \dot{\gamma}^{(c)}$$

Además, tomamos la asunción modelo que

$$h_{pc} = qh_{pp} \quad h_{cp} = qh_{cc} \quad (\text{Ec. 2.118})$$

$$h_{pp} = h(Y^{(p)}) \quad h_{cc} = h(Y^{(c)})$$

Aquí  $q$  es un cociente “constante” entre el índice de endurecimiento latente y el índice de auto endurecimiento, cuya nuestra discusión anterior indicó que estaba en la gama  $1 \leq q \leq 1.4$ . Finalmente elegimos, para la ilustración



$$h(\gamma) = h_0 \sec h^2 \left( \frac{h_0}{\tau_s - \tau_0} \right) \quad (\text{Ec. 2.119})$$

una forma útil que Peirce *et al*(1982) han encontrado recientemente para modelar cristales de aleación de aluminio. En Ec. (2.1119)  $h_0 = 8.9 \tau_0$  y  $\tau_s = 1.8 \tau_0$  fue encontrado para comprobar los datos de endurecimiento por deformaciones de Chang y de Asaro (1980) para el aleación de aluminio con 2.8 % del peso de cobre. Ahora, volviendo al modelo del Fig.23 observamos que cuando el cristal se supone elásticamente rígido, Ec(2.27) da

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}^* \cdot \mathbf{F}^P \quad (\text{Ec. 2.120})$$

Donde  $\mathbf{F}^*$  corresponde a una rotación rígida del cristal por el  $\beta$ , y  $\mathbf{F}^P$  es calculado integrando la expresión [derivada de Ec(2.37)]

$$\dot{\mathbf{F}}^P = \left[ \dot{\gamma}^{(P)} \mathbf{s}^{*(P)} \mathbf{m}^{*(P)} + \dot{\gamma}^{(c)} \mathbf{s}^{*(c)} \mathbf{m}^{*(c)} \right] \cdot \mathbf{F}^P \quad (\text{Ec. 2.121})$$

Si  $\mathbf{e}_2$  es un vector unitario alineado a lo largo de la fibra I, el requisito que I siga siendo la vertical (es decir, a lo largo de  $x_2$  el eje) implica que

$$\mathbf{F} \cdot \mathbf{e}_2 = \lambda \mathbf{e}_2 \quad (\text{Ec. 2.122})$$

De cuál concluimos que

$$F_{12} = 0 \quad (\text{Ec. 2.123})$$

y

$$\tan \beta = F_{12}^P / F_{22}^P \quad (\text{Ec. 2.124})$$

Una expresión para  $\dot{\beta}$  sigue distinguiendo Ec (2.124)

$$\dot{\beta} = \cos^2 \beta \left( \frac{\dot{F}_{12}^P}{F_{22}^P} - \frac{F_{12}^P \dot{F}_{22}^P}{(F_{22}^P)^2} \right) \quad (\text{Ec. 2.125})$$

También observamos que los dos tensiones de cortadura resueltas requeridas en Ec (2.115) están calculadas en cualquier momento en cualquier etapa con

$$\tau^{(P)} = \sigma/2 \sin (2\phi - 2\beta) \quad (\text{Ec. 2.126})$$

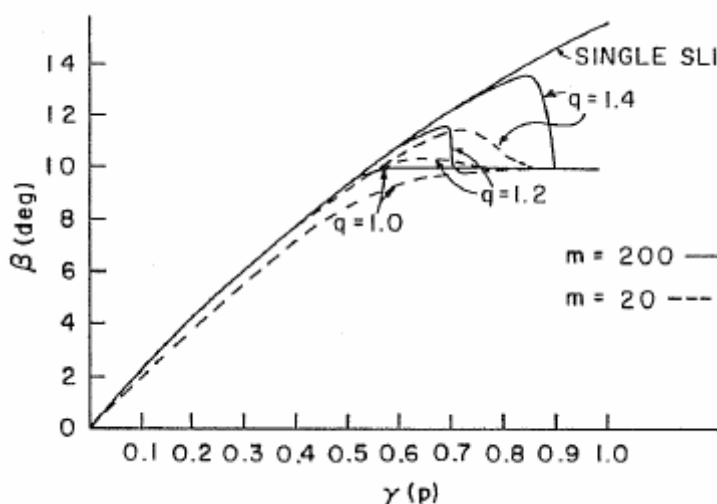
y

$$\tau^{(c)} = \sigma/2 \sin (2\psi + 2\beta) \quad (\text{Ec. 2.127})$$



El sistema de las ecuaciones (2.114)-(2.126),(2.127), se puede emplear en un esquema de integración del tiempo sencillo para calcular el  $\beta$ ,  $\gamma^{(P)}$ ,  $\gamma^{(C)}$ , y sus derivadas en función del cociente del estiramiento  $\lambda$ .

La figura 36 muestra los resultados de un tal cálculo en los cuales  $\dot{\lambda} = l/l_0 = 10^{-2}$  y  $\dot{\alpha}^{(P)} = \dot{\alpha}^{(C)} = 10^{-2}$ . Dos niveles de sensibilidad del índice de deformación eran considerados correspondiendo a  $m = 200$ , y  $m = 20$ , y tres niveles de endurecimiento latente correspondiendo a  $q = 1$ ,  $q = 1.2$ , y  $q = 1.4$ . Además una orientación inicial fue tomada para la cual  $\varphi = 40^\circ$  y  $\psi = 20^\circ$ ;  $\varphi + \psi = 60^\circ$  corresponde al ángulo entre las direcciones primaria y secundaria del deslizamiento en cristales fcc



**Fig. 36**

*Enreje el  $\beta$  de la rotación contra la tensión primaria del esqueleo para los varios leyes constitutivos tarifa-dependientes. Observe eso con  $q > 1$  legue más allá se observa, aun cuando el resbalón conyugal sensible comienza antes de que se alcance la posición de la simetría*

Cuando  $m = 200$ , el efecto de  $q > 1$  es de promover esencialmente deslizamiento simple hasta que el sistema secundario llegue a ser activo y causa la rotación reversa. El secundario se produce muy precipitadamente, como es confirmado por los índices de deformación calculados (no mostrados). En este caso de la sensibilidad al índice bastante débil,  $1 \leq q \leq 1.4$  conduce a un adelantamiento de en medio 0 y  $3.6^\circ$ . Cuando  $m = 20$  la fenomenología es bastante diferente, porque incluso cuando  $q$  es tan grande como 1.4, un deslizamiento secundario perceptible ocurre antes de que la posición de la simetría de  $\beta = 10^\circ$  sea alcanzada. No obstante, un adelantamiento hasta  $1.5^\circ$  se convierte con  $q = 1.4$ . Luego, se observa que la sensibilidad a los índices, conjuntamente con endurecimiento latente fuerte, ofrece un medio posible para explicar la rotación del mallado (Mitchell y Thorton (1964) y Joshi y Green (1980)). Hasta que más datos de este tipo esté disponible, especialmente datos que incluyen efectos del índice, será difícil describir el endurecimiento latente con más detalles. No obstante, aparece que una sugerencia de Kocks (1970) que  $q$  se echa



sobre la gama 1-1.4 da una estimación razonable del endurecimiento latente en cristales fcc.

Finalmente, observamos que otras formas específicas para las leyes de endurecimiento que no dependen de índice se han propuestas. Por ejemplo, según lo mencionó Havner y compañeros de trabajo (1977.1978) y Peirce y otros (1982), hay ventajas de cálculo distintos imponiendo simetría de la matriz C en Ec(2.76). Simetría de C, sin embargo, requiere la simetría de la matriz  $g_{\alpha\beta}$ , que alternadamente implica una asimetría adentro de  $h_{\alpha\beta}$ . Havner y Shalaby(1977) han sugerido una ley de endurecimiento de la forma

$$h_{\alpha\beta} = H_{\alpha\beta} + P^{(\alpha)} : \beta^{(\alpha)} \quad (\text{Ec. 2.128})$$

En su “teoría simple” toman  $H_{\alpha\beta}$  simétrico y fijan todos los elementos  $H_{\alpha\beta} = H$ . Esto tiene el efecto de introducir un endurecimiento latente muy fuerte cuyo debían describir el adelantamiento. Peirce *et al.*(1982) han sugerido una forma modificada de tal ley

$$h_{\alpha\beta} = H_{\alpha\beta} + \frac{1}{2} (\beta^{(\beta)} : P^{(\alpha)} - \beta^{(\alpha)} : P^{(\beta)}) \quad (\text{Ec. 2.129})$$

la cual mostraron que conduce a menos importante endurecimiento latente, más conforme a experimentos pero también que preserva la forma de la simetría de  $g_{\alpha\beta}$ . Estas formas pueden efectivamente ser convenientes para los propósitos específicos, pero se debe de recordar que los Ec(2.128) y (2.129) no diagonales tienen el efecto de juntar los elementos de  $h_{\alpha\beta}$  al nivel actual de la tensión vía los  $\beta$ . Esto puede introducir un endurecimiento latente demasiado fuerte para corresponder a observaciones experimentales, que puede conducir a una pérdida prematura en la unicidad para el modo de deslizamiento. Además, puesto que el cociente entre la tensión y el módulo de endurecimiento del plano del deslizamiento llega a ser perceptiblemente más grande que la unidad (de la orden 10-100 en cristales fcc después de deformaciones finitas; véase Mitchell, 1964 o Chang y Asaro, 1981), estos términos de tensión pueden dominar de tal manera que la descripción experimental o física del endurecimiento del material, que viene del H, se pierde.







### 3. HERRAMIENTAS INFORMATICAS

Los ordenadores usados por este proyecto fueron Dell Pentium 4 con más de 2 GB de RAM

Todas las modelizaciones de este proyecto se realizaron empleando el programa ABAQUS 6.4.

Todos los resultados de este proyecto se observaron por el programa ABAQUS 6.5

ABAQUS es un programa informática ampliamente utilizado para efectuar análisis numéricos de varios tipos como cálculos de estructuras, problemas de contacto, resistencia y fractura...

Una de sus ventajas es que agrupa una interfaz de concepción CAD( ABAQUS/CAE) y un programa de resolución por elementos finitos (ABAQUS Standart/Explicit)

#### 3.1. Introducción a ABAQUS

Un análisis completo utilizando ABAQUS se puede dividir en tres etapas:

- Pre-processing
- Simulación
- Post processing

Estas tres etapas vienen relacionadas entre ellas por archivo como lo presentaremos a continuación.

Pre-Processing(ABAQUS/CAE)

Durante esta etapa que permite modelizar el problema real, se crea un archivo denominado "Input File"(\*.inp). Este archivo contiene toda la información sobre la geometría y la malla del modelo, condiciones de contorno e información sobre las variables de salida del modelo para el posterior análisis de resultados.

Aunque el modelo se suele diseñar utilizando la interfaz CAD (ABAQUS/CAE) o un programa externo(SolidWorks, AutoCAD, Catia,...) también se puede crear el modelo programando un "Input File" como lo explicaremos más adelante. Sin embargo, esta opción no esta adecuada para modelos complejos.

Simulación(ABAQUS Standart/Explicit)



Durante la simulación se crean varios archivos. Entre ellos, el "Status File" (\*.sta) que nos permite consultar el numero de incrementos necesarios para cada etapa de resolución, el "Message File"(\*.msg) que nos informa de los errores que ocurren durante la simulación, el "Data File"(\*.dat) que contiene todos los datos sobre el modelo como por ejemplo el número de elementos, o el número de grados de libertad(DOF)

Si no hay errores durante la simulación , obtenemos al final un archivo "Outpout File"(\*.odb) que contiene todos los resultados para el posterior análisis

.

#### Post-Processing

Una vez los resultados obtenidos, se puede consultar el "Output File" en el modulo de visualización de ABAQUS y elegir los variable que queremos observar, las curvas, los campos, las animaciones,....



## 4. MODELIZACION DEL ENSAYO DE MICRO-INDENTACION

### 4.1. Creación de la malla

#### 4.1.1. Introducción

La primera etapa fue de crear una malla suficientemente fina para que pueda reflejar lo más exactamente posible la prueba de micro indentación, pero con un número de elementos limitados para no volver el tiempo de cálculo prohibitivo.

Ya existía una malla que daba buenos resultados en carga sobre simple cristal de cobre (Fig.39) que contenía 7400 elementos. El Dr. Jorge Alcalá me propuso precisar esta malla para mejorar el modelo. Pero el departamento de mecánica y metalurgia del ETSEIB ya no tenía más que las " Output Files " de esta malla. Pues debió crear enteramente una malla con el programa informático ABAQUS/CAE

#### 4.1.2. Modificaciones introducidas a la nueva malla

¿Cuáles debían de ser las modificaciones que debía introducirse a esta nueva estructura? Como precisar la dimensión de la malla? ¿Y con qué proporción?

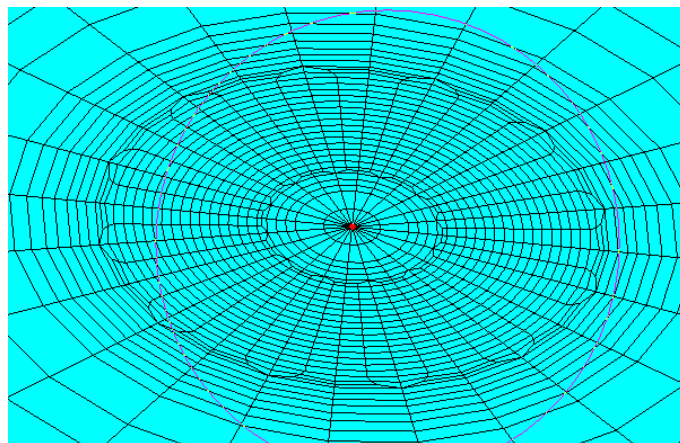
Ahí están las cuestiones principales a las cuales debía responder para crear esta nueva malla.

Los elementos situados más cerca del punto de contacto con el indentador serán los que se deformarán más, obviamente, pues a priori son aquellos que sería necesario afinar. Pero si se efectúa el refinamiento así, el número de elementos total, será multiplicado por 10, a causa de las transiciones que deben respetarse entre elementos. Es por eso que he decidido afinar la parte presentada sobre la Fig. 40, la que permanece cerca del punto de contacto y cuyo refinamiento no generara un número excesivo de elementos.

Dicho esto esta reorganización duplicaba a pesar de todo el número de elementos de la malla que contaba ya más 7000 y cuyo cálculo de la prueba duraba 4 días, sabiendo que este tiempo aumenta exponencialmente con el número de elementos. Por ello, se decidió reducir el número de los elementos de la superficie suprimiendo las divisiones del centro (Fig. 37 y 38) para llegar al final a una malla con poco más de 10000 elementos, lo que representa un aumento + del 25% respecto al número de elementos

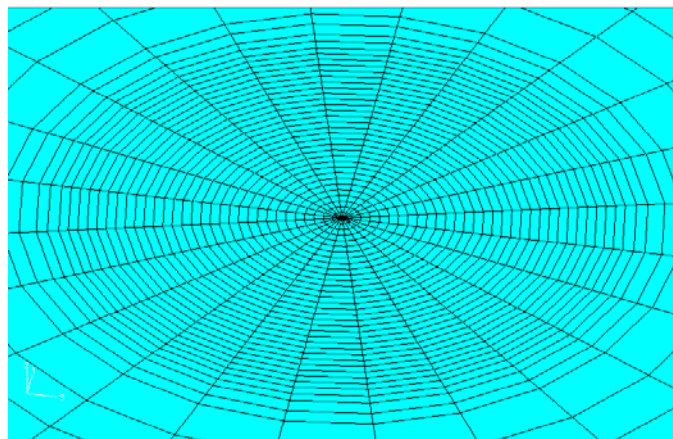


de la antigua malla



**Fig. 37**

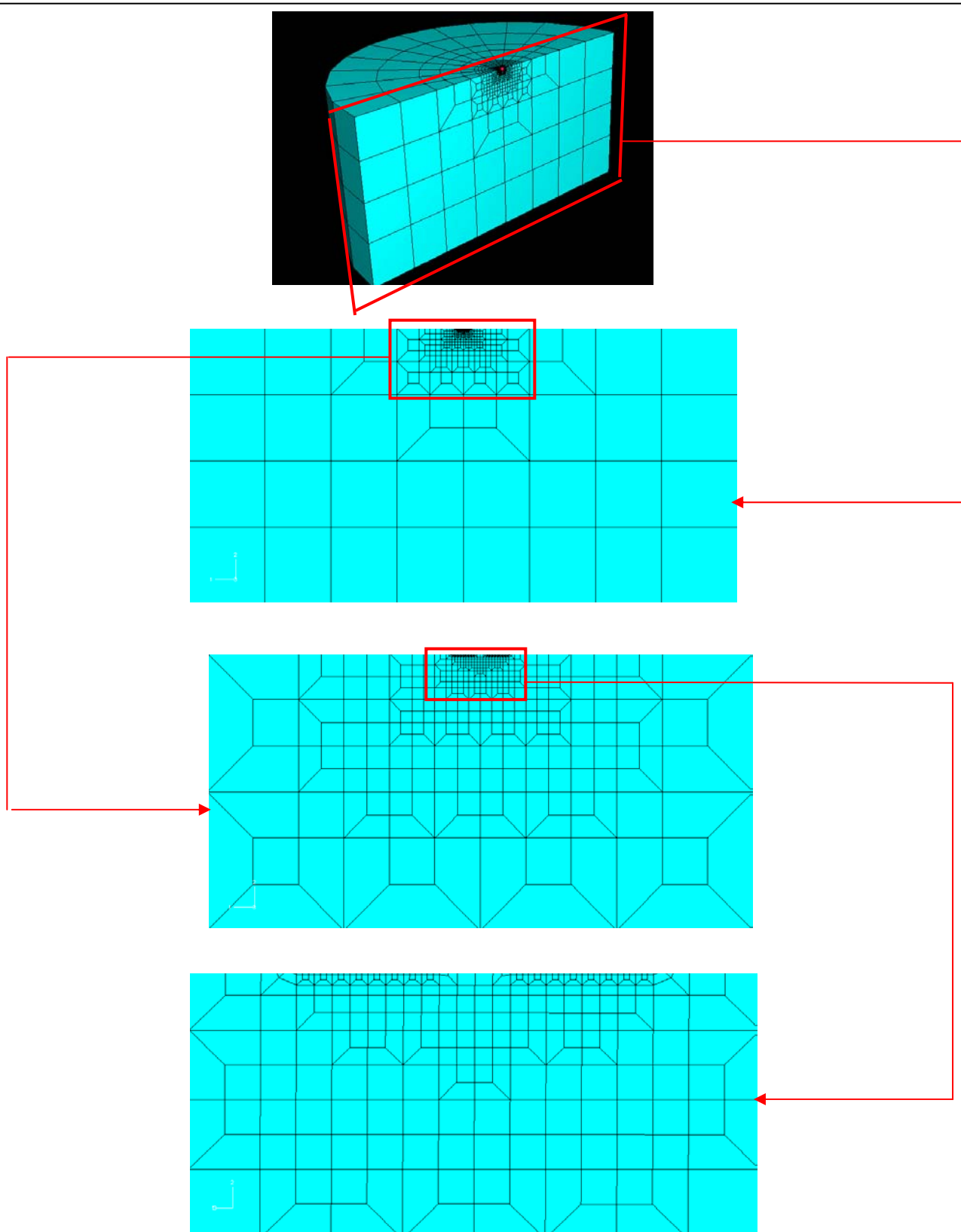
*Centro de la superficie de la malla antigua*



**Fig. 38**

*Centro de la superficie de la nueva malla*

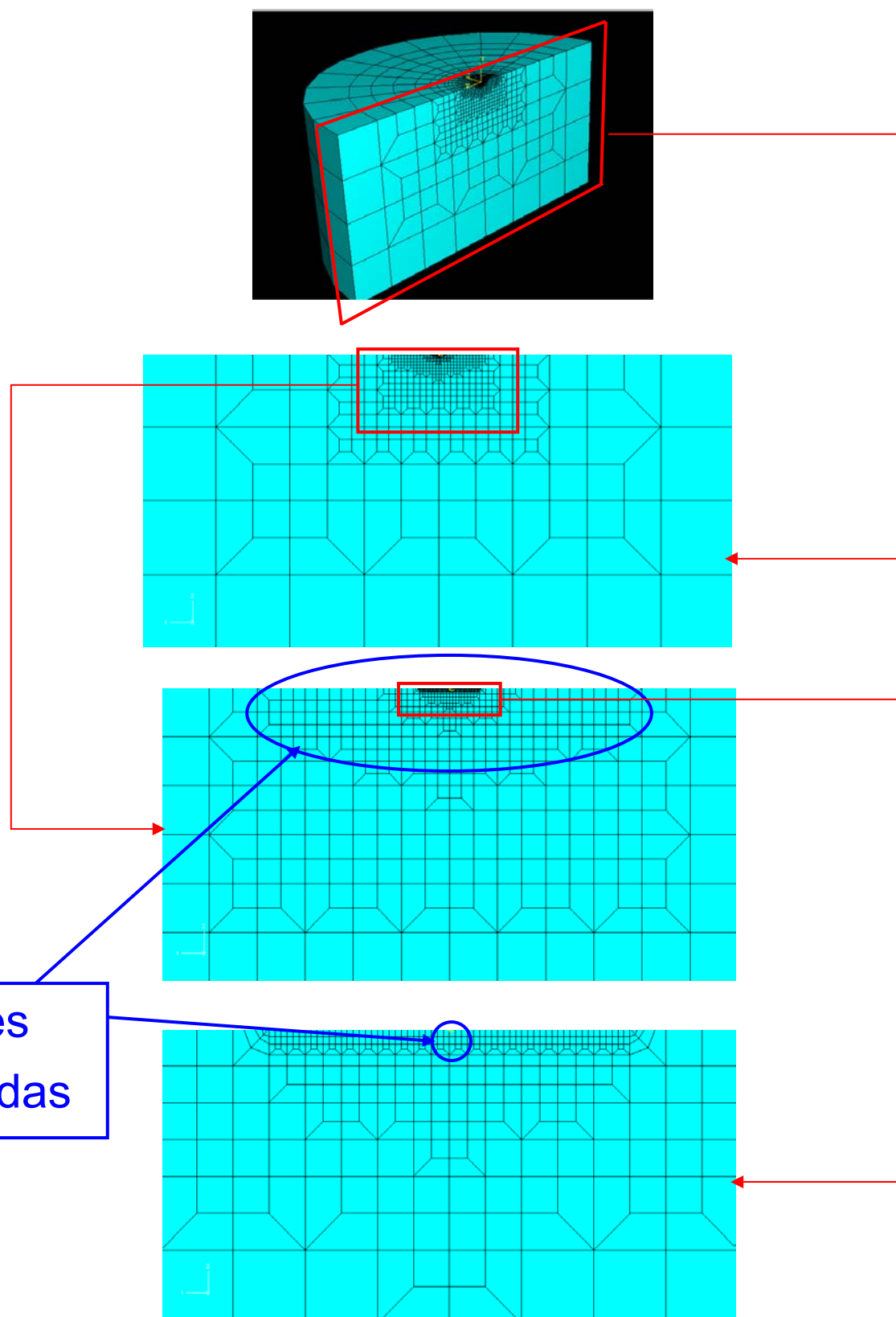




**Fig. 39**

*Corte del cristal y detalles sucesivos de la malla antigua*





**Fig. 40**

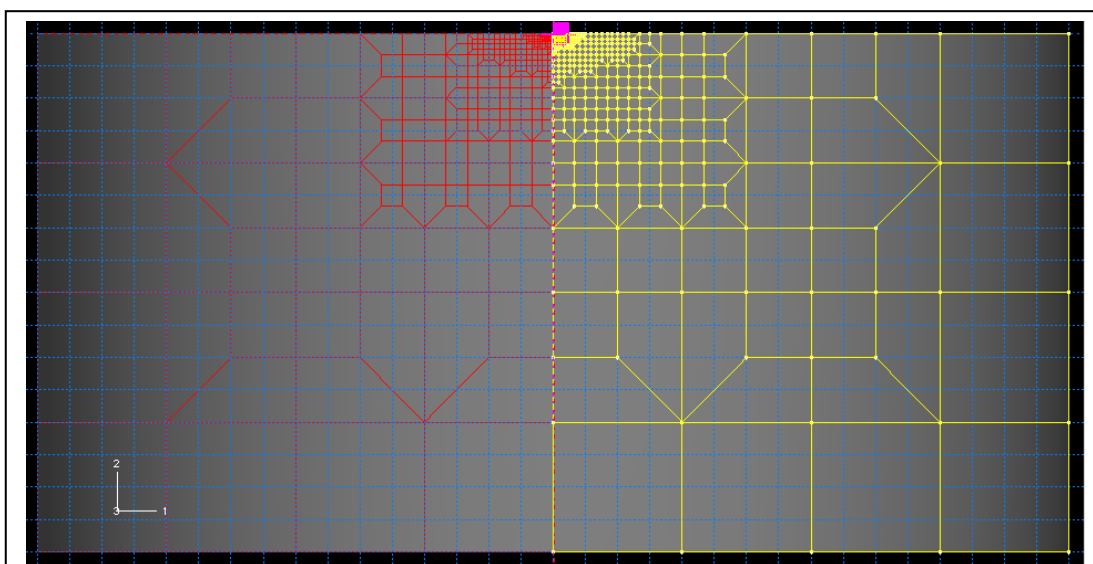
*Corte del cristal v detalles sucesivos de la nueva malla*



#### 4.1.3. Historial de la creación

En primer lugar, intenté de trabajar a partir ir de la antigua malla (Fig.39) intentando de reorganizarlo manualmente, recortando y en volviendo a pegar las partes modificadas, porque solo tenía acceso al "Input File" de este estudio, pero este tentativa fue infructuosa porque ABAQUS no permitía de recomponer la malla en totalidad.

Pues decidimos después, con el profesor Alcala, concebir enteramente una nueva malla, esto nos permitiríamos obtener exactamente la malla que queríamos. Así dibujé sobre papel primeramente el corte de la malla a fin de imaginar los elementos interiores de esta malla. Una vez mi esquema validado por el Dr. Alcala, dibujé este corte en la parte "Sketch" del menú "Parte" del programa informático (Fig. 41).



**Fig. 41**

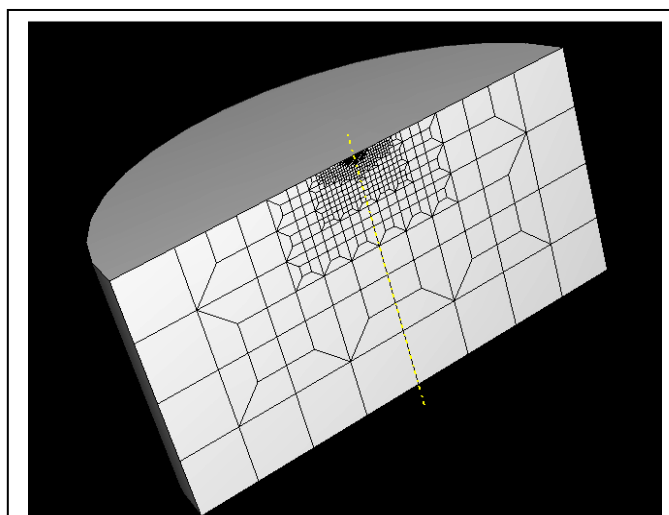
*Esquema del corte del cristal bajo la carta "Parte"*

Luego creímos un sólido por revolución a 360° de este corte, este sólido representaba pues el cristal que se iba a someterse a carga. Solo quedaba pues por mallar este cristal en el menú "Mesh" según las aristas que se había dibujado en el menú "Part". Desgraciadamente no se podía tener acceso a todas las aristas internas del sólido en el menú "Mesh", no podía pues recortar más mi sólido según las aristas que había dibujado.



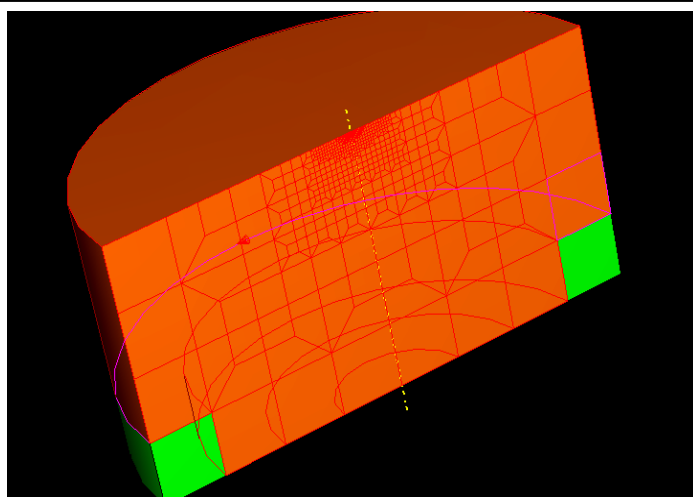


La solución siguiente consistió en concebir dos sólidos idénticos de  $180^\circ$  cada uno (Fig. 42) a partir del mismo "sketch", de mallarlos individualmente creando tanto divisiones como de cuadriláteros dibujados (Fig. 43) y de ensamblarlos para formar el cristal utilizando la función "Merget" en el menú "Assembly" (Fig. 47). En efecto de esta manera podía seleccionar cualquier arista en el menú "Mesh".



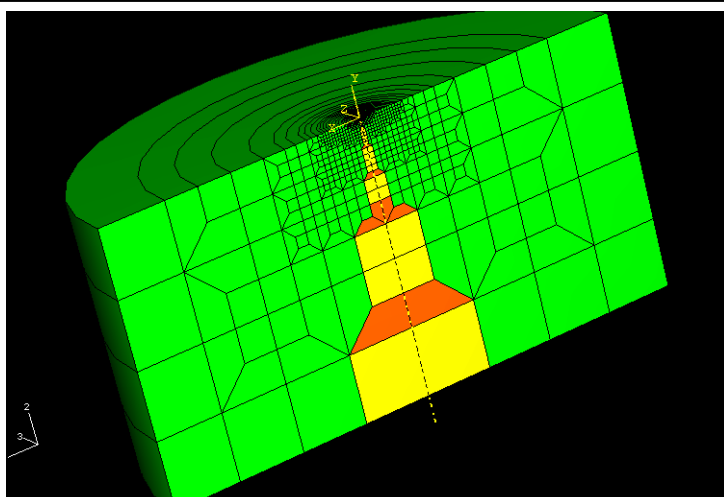
**Fig. 42**

*Sólido obtenido después de revolución de  $180^\circ$*



**Fig. 43**

*Creando divisiones*

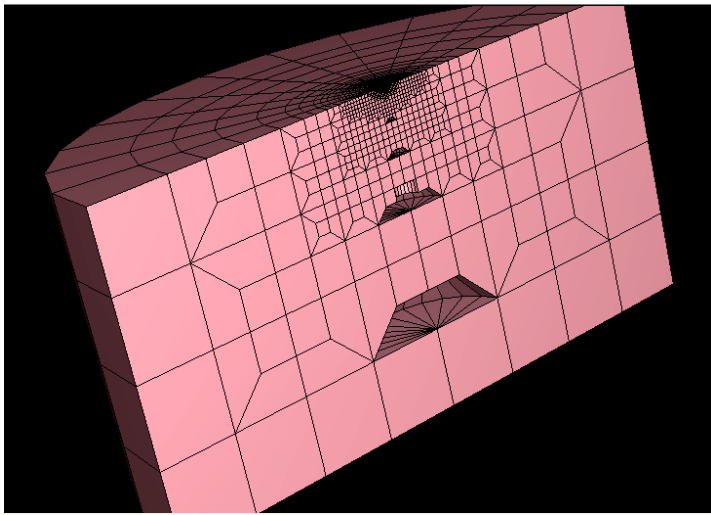


**Fig. 44**

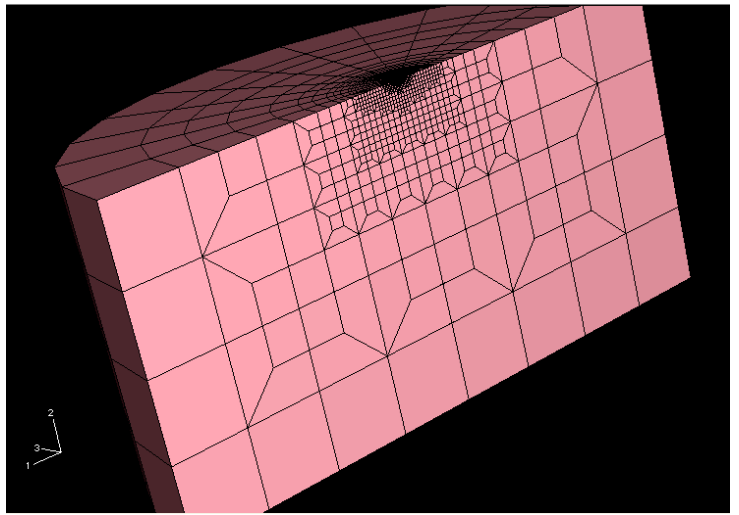
*Elementos centrales ausentes de la base de datos de ABAQUS*



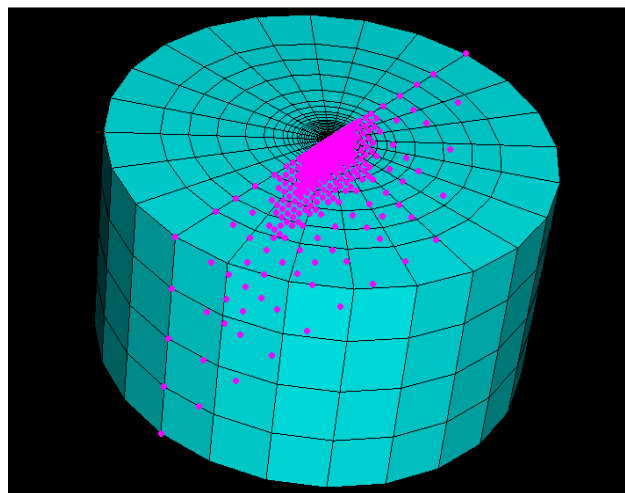
Nos encontramos sin embargo con otro tipo de problema. ABAQUS no permite mallar algunos elementos adyacentes tiene la línea central del sólido (Fig. 44) del hecho de que estos elementos no estuvieran presente en la base de datos de ABAQUS. Pues se debió crear estos últimos manualmente publicando una malla llamada "Orphean Mesh" (Fig. 45 y 46) y al final pegar las dos mitades de malla con la función "Merge" para obtener la nueva malla (Fig. 47)

**Fig. 45**

*Malla sin los elementos hechos manualmente*

**Fig. 46**

*Malla terminada*

**Fig. 47**

*Obtención de la malla entera por "merging"*



## 4.2. Definición de los recubrimientos y de los sustratos

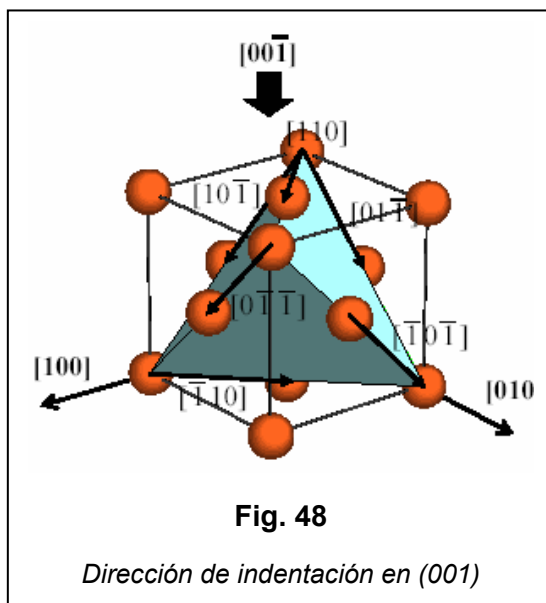
### 4.2.1. Los “element sets”

En este estudio, vamos a observar la respuesta a indentación Berkovitch de un sólido constituido de un recubrimiento delgado de cobre, sobre un sustrato de silicio. Entonces, aparece obvio que estas dos partes no pueden estar modelizadas con el mismo modelo de material.

Por eso, vamos a dividir la malla en dos partes: el recubrimiento, y el sustrato; definiéndolos como “Element Sets”. Este nos permiten trabajar de manera separada con los dos de “Element Sets”. Entonces podemos dar a cada uno su propio modelo de material.

### 4.2.2. Utilización de los modelos de materiales

El recubrimiento delgado a la superficie del sólido estará en contacto con el indentador y va a sufrir directamente la carga, pues las deformaciones de sus elementos serán las más importantes del sólido, y entonces, el límite de deformación elástica será sobrepasado. Es decir que los elementos del recubrimiento van a deformarse plásticamente, y que tenemos de aplicar a este recubrimiento un modelo de plasticidad, pero como el ensayo es una nanoindentación de un simple cristal, no podemos poner un modelo de plasticidad continuo (Tresca, Von Mises,  $J_2$  flow...) , es por eso que necesitamos utilizar el modelo de plasticidad cristalina que hemos explicado en la parte 3.3.2. Además utilizaremos este modelo de manera que la dirección de indentación sea colineal a la dirección cristalográfica (001) como lo muestra la Fig. 48



El sustrato represente más del 90% de la malla ,pues, modelizaremos este sustrato con un modelo continuo, además, la profundidad de indentación esta tan reducida que los elementos del sustrato se deformaran muy poco, entonces, aplicaremos solo un modelo de elasticidad lineal anisotrópica que hemos explicado en la parte 3.3.1

Estos modelos fueron añadidos al proyecto utilizando “subrutinas”. No detallaremos esta parte que constituiría otro estudio pero podemos notar que la subrutina utilizada para asignar el modelo de plasticidad cristalina es la subrutina UMAT<sup>3</sup>

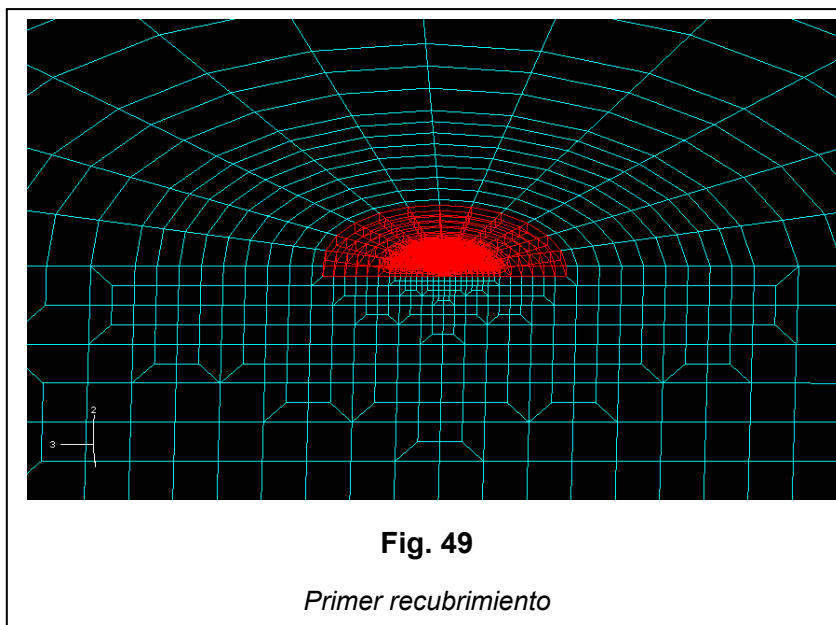
#### 4.2.3. Definición de los recubrimientos

Queremos hacer dos ensayos con dos recubrimientos de diferente espesor para ver el que dará la mejor respuesta y también como la relación entre el espesor del recubrimiento y la del sustrato va a influir sobre los resultados.

Es decir que vamos a diseñar dos tipos de “element sets” para el recubrimiento:

-Un primero (Fig. 49), muy pequeño con 2712 elementos y de espesor  $e$  de 2 unidades<sup>4</sup> de ABAQUS

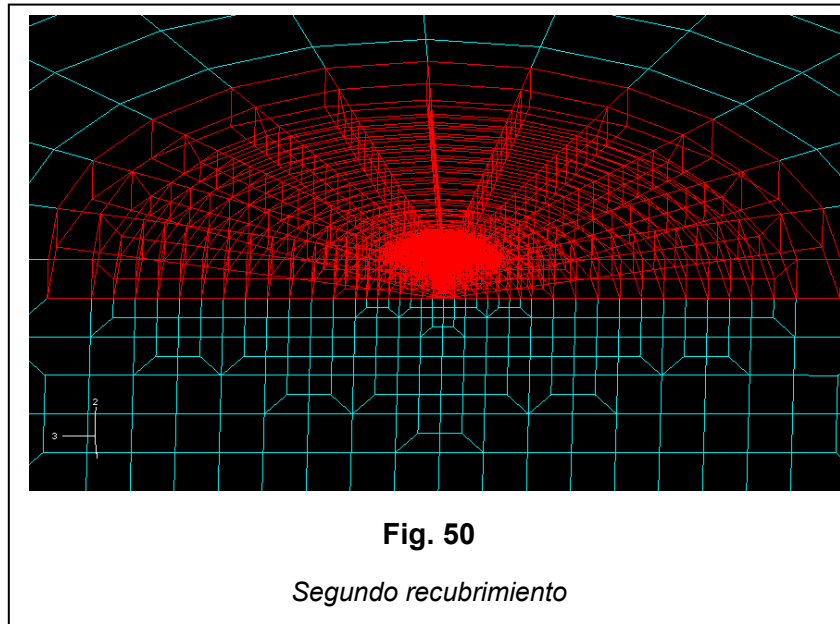
-Un segundo (Fig. 50) mas grande de 3560 elementos y de espesor  $e$  de 8 unidades de ABAQUS



<sup>3</sup> Esta subrutina esta ampliamente usada para trabajar con plasticidad cristalina en ABAQUS. Hemos utilizado el articulo de Y. Huang(1991) para conseguirlo

<sup>4</sup> ABAQUS/CAE trabaja sin unidades, entonces los resultados solo dependen de la manera de ponerlos en los parámetros del material. Véase el capitulo





### 4.3. Definición del contacto

El contacto entre el indentador y el sólido se modelará de esta manera:

- Comportamiento tangencial: sin fricción

Esta solución fue elegida para simplificar los cálculos pero en realidad existe un coeficiente de fricción cinética  $\mu_c$  entre el indentador y el sólido, entonces una fuerza de fricción cinética  $f_c$  nace con el contacto del tipo

$$f_c = \mu_c N$$

donde  $N$  es el módulo de la proyección sobre la normal del plano de contacto entre el indentador y el sólido de la fuerza impuesta por el indentador. Pero el valor de  $\mu_c$  es reducido y por eso, podemos modelizar el contacto sin fricción como una primera aproximación.

Comportamiento normal: “hard contact”

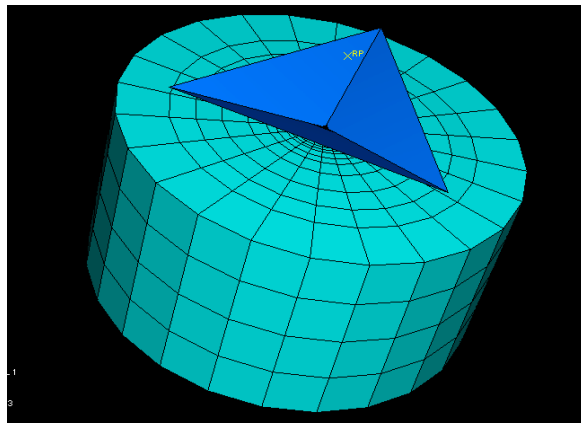


Este tipo de contacto prohíbe la interpenetración del indentador en el cristal

#### 4.4. Carga y condiciones de contorno

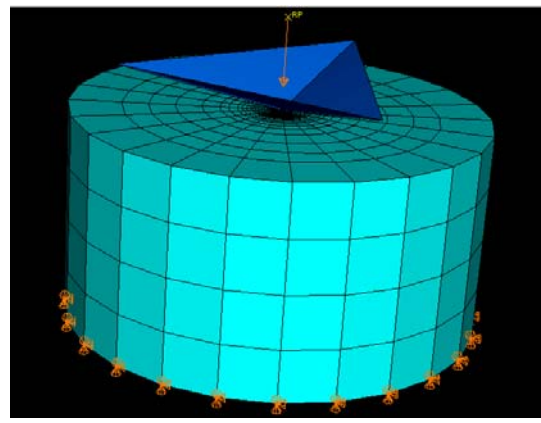
La carga debe aplicarse al punto de referencia del indentador, ya que éste fue definido como lo vimos anteriormente como un sólido rígido. El punto de referencia se colocó arriba del indentador (Fig. 51). Pero en realidad, la penetración del indentador no será modelizada como una carga pero como un desplazamiento, es decir que al lugar de aplicar una carga (pues, una presión que se expresa en Newton), vamos a aplicar un desplazamiento del indentador<sup>5</sup> (pues una longitud expresada en metros).

Las condiciones de contorno deben fijar el cristal en las 3 dirección de translación, se aplicarán a todos los nudos inferiores del cristal(Fig. 52)



**Fig. 51**

*Colocación del indentador*



**Fig. 52**

*Carga y condiciones de contorno*

<sup>5</sup> La amplitud del desplazamiento impuesta será dada en el capítulo 8



## 5. VARIABLES CALCULADAS

Analizaremos dos tipos de resultados en este estudio: las variables de campo y las variables históricas. Estos dos tipos de variables son muy diferentes como vamos a verlo.

### ▪ Variables de campo

Son los diferentes campos, y sus evoluciones con el tiempo que podemos pedir a ABAQUS de ver directamente sobre el cristal. Sobre todas las variables del campo que hemos pedido, vamos a observar 3 de ellas más significativas:

- El campo de deformación de cortadura total sobre todos los sistemas de deslizamiento

- El campo de la densidad de dislocaciones

Estas variables nos darán un resultado visual muy significativo del comportamiento de los materiales

### ▪ Variables históricas

También hemos pedido a ABAQUS que calcule para cada “step time” algunas variables y que les guarde en memoria. Podremos así obtener, relacionando estas variables, otros parámetros y trazar sus gráficos. Las variables histórica son:

- El desplazamiento del indentador  $U$  (igual a la profundidad de penetración  $h$ )
- La fuerza de reacción  $R_f$  del cristal al contacto del indentador. Que es igual a la carga  $P$  porque al estar en equilibrio  $P \approx R_f$ )
- El área del cristal en contacto con el indentador  $CAREA$ . Este superficie está relacionada al área proyectado de la huella  $A$ :

$$A = CAREA \cdot \sin \theta$$

Donde  $\theta$  es el ángulo de la punta del indentador

La suma de todos estos variables para cada recubrimiento nos permitirá obtener resultados de los cuales podremos sacar conclusiones en cuanto a la influencia del sustrato y del espesor del recubrimiento sobre la respuesta al contacto



## 6. UNIDADES DE MEDIDAS

ABAQUS trabaja sin unidades, entonces las unidades de los resultados que obtendremos solo dependerán de la manera con la cual hemos introducido las constantes mecánicas en el software.

Hemos utilizado una “subrutina” UMAT en la cual fueron ya introducidas estas características.(por antiguos proyectos), y fueron introducidas de manera que:

1m = 1 unidad de ABAQUS.

Pero este proyecto trata de micro mecánica, entonces los espesores de los recubrimientos que estudiamos son de algunos micrómetros( por ejemplo , los circuitos impresos en microelectrónica tienen recubrimientos de espesores típicos 17.5,35, 70 o 105  $\mu\text{m}$ ).

Tenemos de una parte dos recubrimientos de respectivamente 2 y 8 unidades de ABAQUS de espesor. Entonces, si consideramos que el espesor de estos recubrimientos puede ser respectivamente 20 $\mu\text{m}$  y 80  $\mu\text{m}$ ( estas valores pertenecen a la gama descrita más arriba), tenemos que convertir las unidades de los resultados que obtendremos.

Tenemos que dividir entonces los valores obtenidos por  $10^5$  para dar un significado físico a nuestros resultados





## 7. PROBLEMAS DE COMPUTACION

Una vez la modelización acabada, lanzamos el cálculo con el primer recubrimiento pero solo pudimos obtener un resultado correcto después varias semanas durante las que hemos encontrado múltiples problemas de utilización de ABAQUS por una parte y de capacidad de ordenadores por otra parte.

### 7.1. Problemas de capacidad de ordenadores

Las primeras pruebas no funcionaron por causa de potencia demasiado escasa del procesador del ordenador sobre el cual habíamos lanzado el cálculo, pues debimos esperar la entrega de una máquina más potente que nos permita obtener resultados.

Las tentativas siguientes sobre la nueva máquina no funcionaron tampoco ya que intentamos paralelizar el cálculo, es decir hacerlo con 2 procesadores al mismo tiempo, a fin de mejorar el tiempo de cálculo (de dividirlo por 2 a lo mejor) pero, desgraciadamente no llegamos a hacer funcionar la paralelización con el programa ABAQUS a pesar de una semana completa de pruebas y otros cambios de parámetros informáticos.

### 7.2. Problemas con ABAQUS

Después de los primeros problemas debidos a las capacidades de las máquinas, encontramos otros problemas más tarde relacionados a la utilización de ABAQUS.

Nos enfrentamos a las dificultades relacionadas a la modificación del "Input File" ya que los modelos de plasticidad cristalina y elasticidad anisótropa son ficheros externos que deben ser introducidos en el programa como "subrutina" directamente en el "Input File".

Por último, para el primer cálculo que pudo ser realizado por ABAQUS (primer recubrimiento) habíamos impuesto un desplazamiento del indentador demasiado importante, esto que generaba a salir de un determinado punto una deformación excesiva de los elementos de la malla próximos al punto de aplicación de la carga. Este cálculo dejó de converger al 85% de la profundidad impuesta, que era de 14  $\mu\text{m}$ . Sabiendo que el grosor del primer recubrimiento es de 20  $\mu\text{m}$ ., habíamos impuesto una profundidad de penetración correspondiendo al 70% del grosor del recubrimiento que nos parecía razonable.



Pues nos reiniciamos con una profundidad de carga que correspondía al 82% de la primera, o sea:  $11.5 \mu\text{m}$  (pues un 57.5% del grosor total del recubrimiento), y finalmente obteníamos un resultado.

Este se ocurrió también con el segundo recubrimiento. Sabiendo que el segundo recubrimiento es cuatro veces más grueso que el primero, decidimos de imponer, en el segundo caso, un desplazamiento de cuatro veces el del primero a saber  $4 * 1.15 = 4.6 \mu\text{m}$ . Pero fue demasiado y el segundo cálculo dejó de converger a  $40.9 \mu\text{m}$  o sea 88.9% de  $46 \mu\text{m}$ .

Pero no tenía el tiempo de empezar un nuevo cálculo (cada cálculo tarda una semana) y además los ordenadores no estaban disponibles. Así no pudimos obtener la curva de descarga del segundo caso pero pudimos recuperar las datas de la carga hasta  $40.9 \mu\text{m}$ .

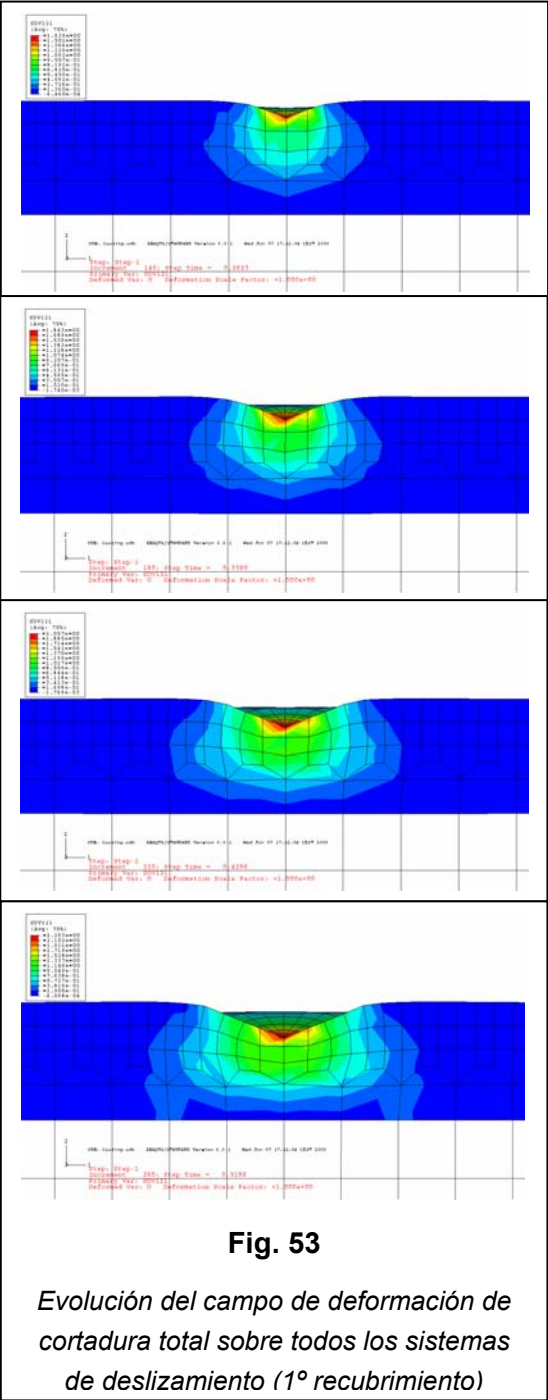


## 8. RESULTADOS

### 8.1. Resultados de campos

#### 8.1.1. Campo de deformación de cortadura total sobre todos los sistemas de deslizamiento

Aquí se puede ver la evolución con el tiempo de carga, de la deformación de cortadura total sobre todos los sistemas de deslizamiento.



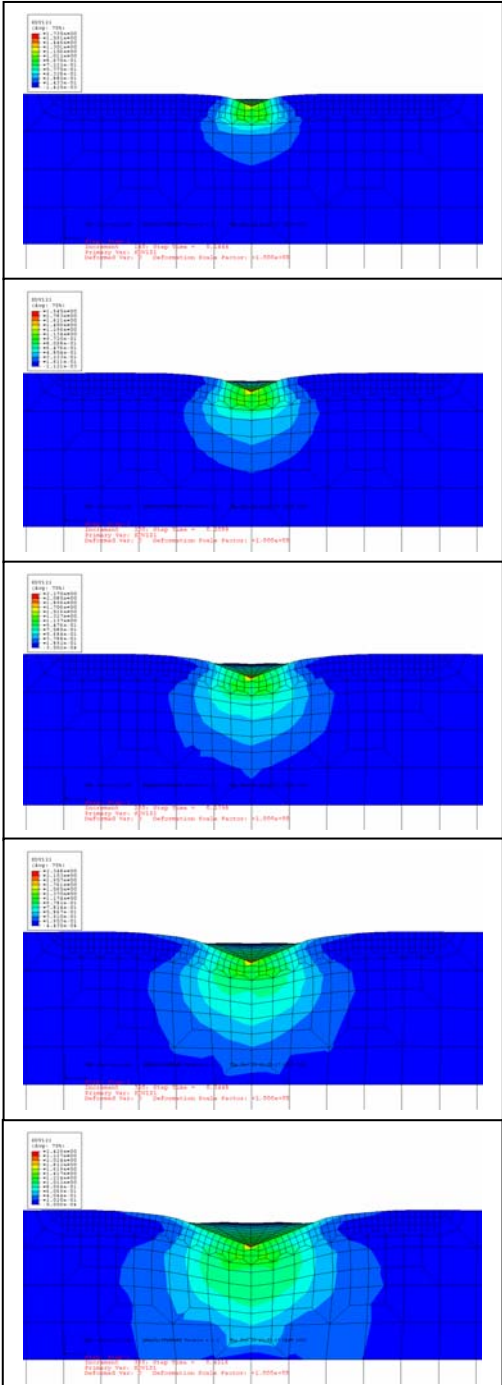
#### Primer recubrimiento

Podemos darnos cuenta primeramente que la forma del campo no es la misma que la de la carga de un simple cristal.

Durante el primero 35 % (las dos primeras ilustraciones) de profundidad de penetración la forma se expende de manera homogénea en todo el recubrimiento, pero después (ilustraciones siguientes), la presencia del sustrato impide la progresión de las deformaciones hacia abajo, entonces las deformaciones mueven hacia los lados del recubrimiento y este crea un cambio de forma del campo de las deformaciones.

Este resultado es muy importante porque muestra la influencia directa del sustrato sobre el comportamiento del recubrimiento del cobre





**Fig.54**

*Evolución del campo de deformación  
de cortadura total sobre todos los  
sistemas de deslizamiento  
(2ºrecubrimiento)*

**Segundo recubrimiento**

Podemos notar que en este caso, la forma del campo al principio es la misma que en el primer caso .Pero aquí la migración hacia los lados aparece más tarde (las dos ultimas ilustraciones) porque el espesor del recubrimiento es más importante en este caso.

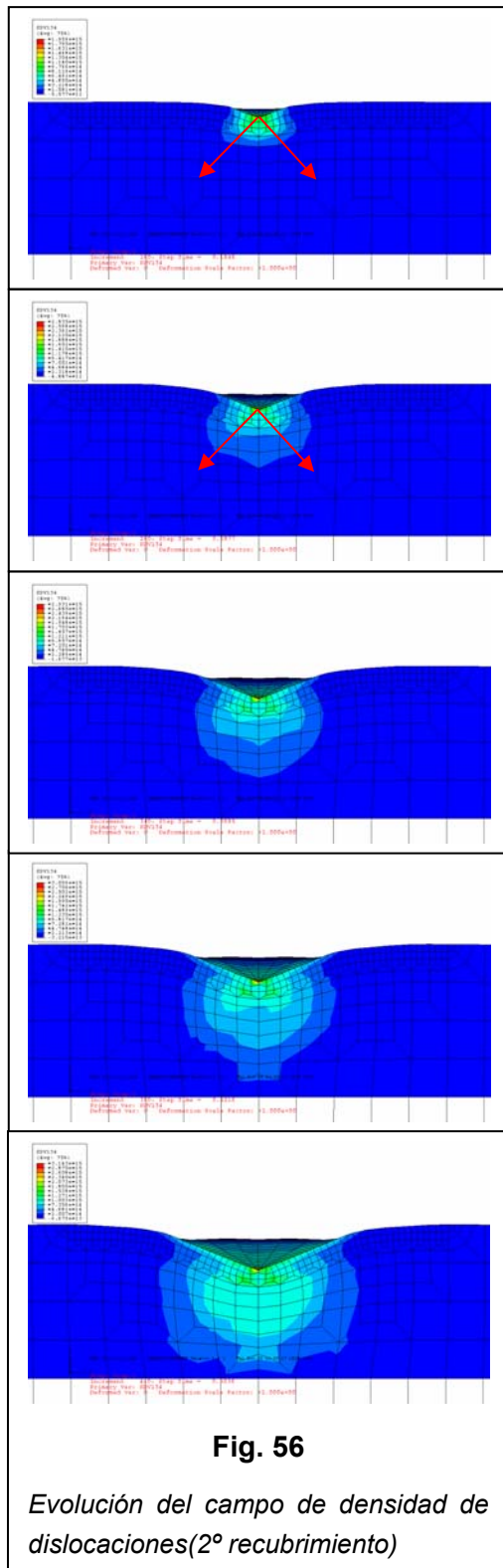
También notamos que aparece una distorsión de la forma del campo de deformación de cortadura total sobre todos los sistemas de deslizamiento al final de la carga(dos ultimas ilustraciones)

Este puede venir del hecho que la migración del campo hacia los lados se realiza menos rápidamente porque el recubrimiento es mas grueso. También eso viene de la deformación de algunos elementos de la malla que empiezan a volverse anormal(véase próximo capítulo)



Entonces, la presencia del sustrato elástico se ve desde el principio y por eso solo la elasticidad del recubrimiento actúa sobre estos campos. Porque si no, hubiéramos visto al principio la misma forma de campo que la de un simple cristal antes que cambie de forma.





### Segundo recubrimiento

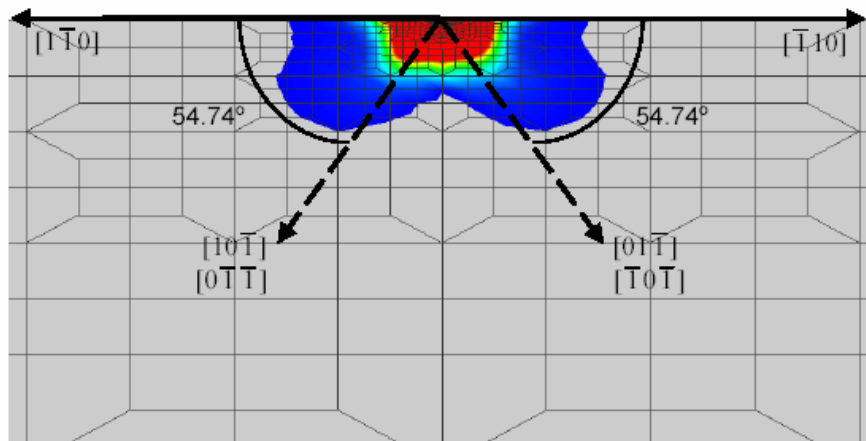
En este caso, el campo de la densidad de dislocaciones al principio del ensayo es parecido al de un ensayo de cristal simple; encontramos las dos direcciones de deslizamiento habituales(las flechas rojas), pero rápidamente, la forma del campo cambia y se vuelve redonda.(tercera ilustración y siguientes)

Entonces podemos ver que en este caso la influencia del sustrato no aparece directamente como en el primer caso(donde la forma típica del campo no aparece nunca) pero después de alrededor del 40% de la penetración máxima(o 20% de la espesor del recubrimiento).

Entonces aquí la influencia del sustrato no esta inmediato y la forma del campo al principio es debida a la plasticidad de del recubrimiento pero aparece rápidamente (la influencia del sustrato ) y cambia la forma del campo por elasticidad.

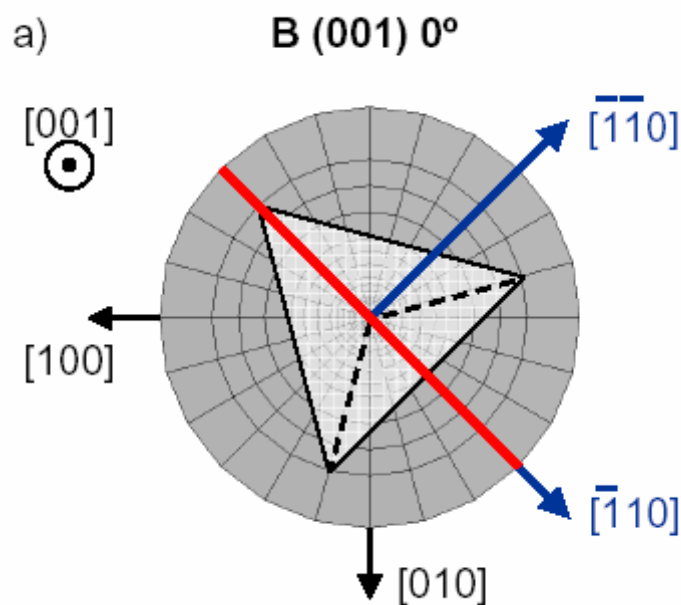
Luego, como con el campo de deformaciones, el campo de densidad de dislocación sufre de distorsiones(ultima ilustración) causadas por la presencia, que se vuelve más importante, del sustrato, y también por las deformaciones incoherentes de ciertos elementos(véase el próximo capítulo)





**Fig. 57**

*Campo de densidad de dislocaciones en el ensayo de micro indentación de tipo Berkovitch de un cristal simple con un modelo de plasticidad cristalina. Los isocontornos de densidad de dislocación que muestran una elongación en las direcciones de deslizamiento son los que corresponden al corte ilustrado Fig. 58.*



**Fig. 58**

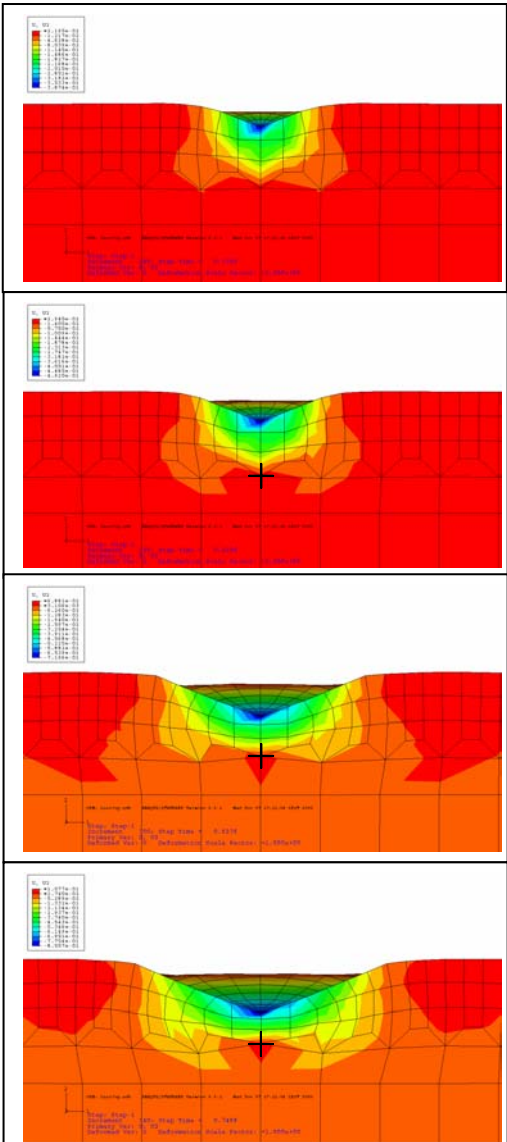
*Orientación y nomenclatura asociada de la indentación de tipo Berkovitch en el plano (001). Una de las aristas está orientada según la dirección  $[110](B (001) 0^\circ)$*



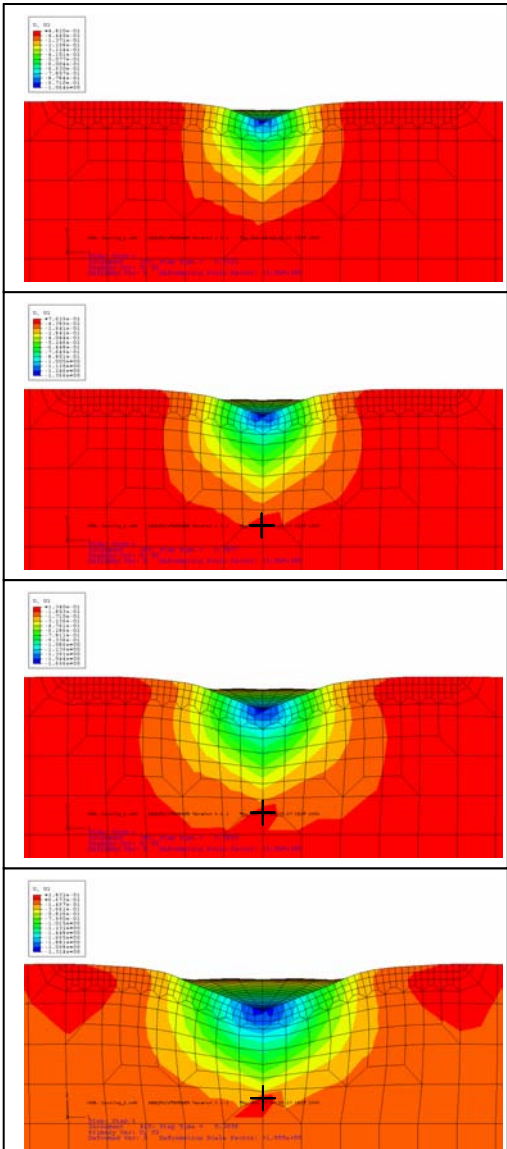


8.2. Deformaciones incoherentes

El cálculo llega a un punto a partir del que las deformaciones de la malla se vuelven incoherentes. Vamos a ver cuando estas deformaciones anormales empiezan, por qué, y cuales son las consecuencias sobre los resultados.



**Fig. 59**  
*Evolución del campo de la  
componente vertical del  
desplazamiento(1º recubrimiento)*



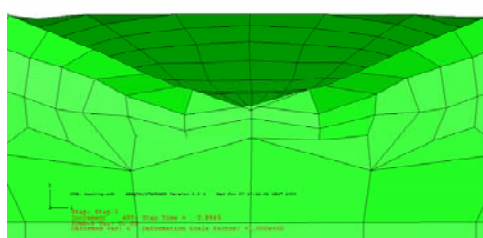
**Fig. 60**  
*Evolución del campo de la  
componente vertical del  
desplazamiento(2º recubrimiento)*





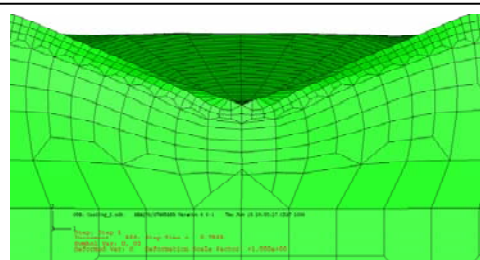
Podemos ver en las figuras 56 y 57 que existe un punto, o más precisamente un nodo, en los dos casos, que tiene, a partir del 50% de la profundidad máxima de carga (es decir al 30% de  $e$ , el espesor del recubrimiento) en el primer caso, y 40% (25% de  $e$ ) un desplazamiento muy anormal porque sube, a lugar de bajar. Entonces el desplazamiento anormal de este punto causa distorsiones en los campos de deformaciones y de densidades de dislocaciones y de este manera falsea los resultados después de 50% de carga.

Además, si continuamos el ensayo, llegue un punto critico en el que los elementos del recubrimiento se interpenetran (Fig. 61 y 62). Esto ocurre a 90% de la carga en el primer caso y a 80 % en el segundo caso.



**Fig.61**

*Auto-interpenetración de la malla(1°  
recubrimiento)*



**Fig. 62**

*Auto-interpenetración de la malla(2°  
recubrimiento)*

Estas anomalías de deformación nos muestran los puntos flacos de la malla. Estas regiones de la malla que tienen un desplazamiento ilógico hubieran debido estar mallado más finamente pero eso hubiera aumentado considerablemente el número de elementos de la malla.



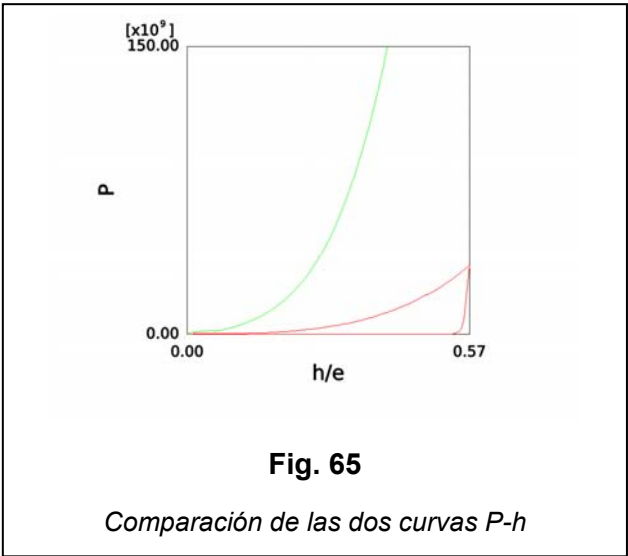
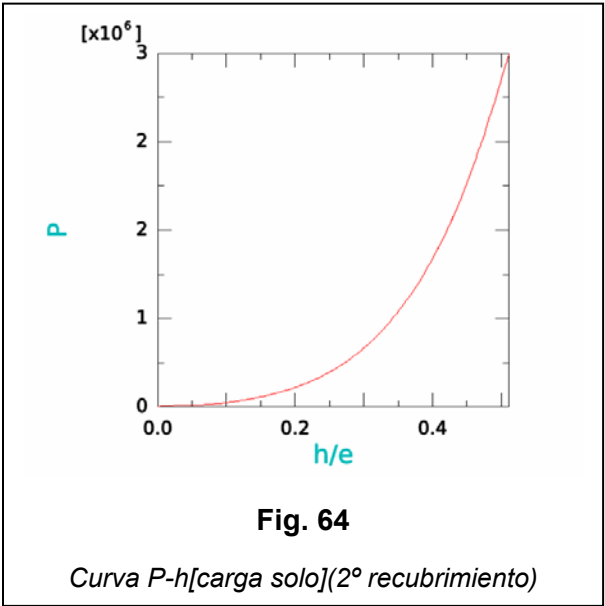
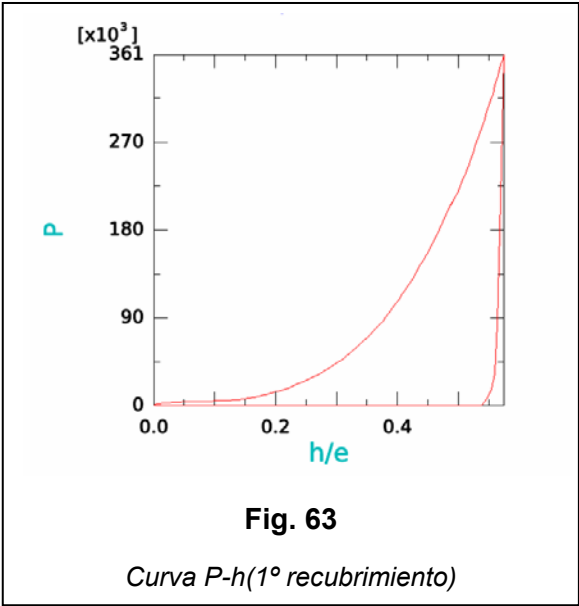
### 8.3. Variables históricas

Estos resultados son curvas que presentan una variable histórica con arreglo a otra variable histórica .Todas las curvas están presentadas en relación al porcentaje de penetración del recubrimiento :

$$\frac{h}{e}$$

Entonces e es diferente para los dos recubrimientos.

#### 8.3.1. Curvas P-h



Se nota que estas dos curvas(Fig. 63, 64 y 65) son muy parecidas. Son muy lisas, muy fluidas y poseen casi ninguna perturbación. Esto traduce *a priori* una buena finura del modelo, pero se puede darse cuenta de que en los dos casos, a partir del momento en que la penetración representa un 30% del espesor del recubrimiento, la curva ya no sigue la parábola  $P=kh^2$  (ver capítulo 3)pero tiende a convertirse en “exponencial”, con lo que alcanza una mayor pendiente cerca de  $h_{max}$ .

Esto se explique ,por parte, a la presencia del sustrato a bajo del recubrimiento pero por otra parte también a la deformación incoherente de los elementos que se deforman hacia arriba y que por consiguiente aumentan anormalmente la presión ejercida.

La curva de la descarga en el primer caso es muy rápida, así obtenemos un  $h_r$  ( $E_c(2.7)$ , Fig. 2) muy cerca de  $h_{max}$ . Eso parece corresponder a la descarga típica de un material simple.

También vemos que la curva P-h del primer recubrimiento esta siempre abajo de la del segundo

### 8.3.2. Estudio de los parámetros H, $\alpha$ y K

En los gráficos de estos parámetros, el eje de las abscisas tiene dos escalas diferentes agrupadas en una sola. Es decir que para cada curva de dureza hemos dividido h por el e correspondiente. Entonces por una misma valor de  $h/e$ , la profundidad de penetración no es la misma en la dos curvas.

Además, en el cuadro 6 se ven los valores de estos 3 parámetros para la indentación de un cristal simple a fin de poder comparar nuestros resultados

Orientation	$\tau_o$ (MPa)	Collinear interaction	$K$ (GPa)	$\bar{p}$ (MPa)	$\alpha$	$h_r/h_{max}$	$h_e/h_{max}$
B (001) 0°	1.0		6.33	304	0.85	0.9901	0.9921

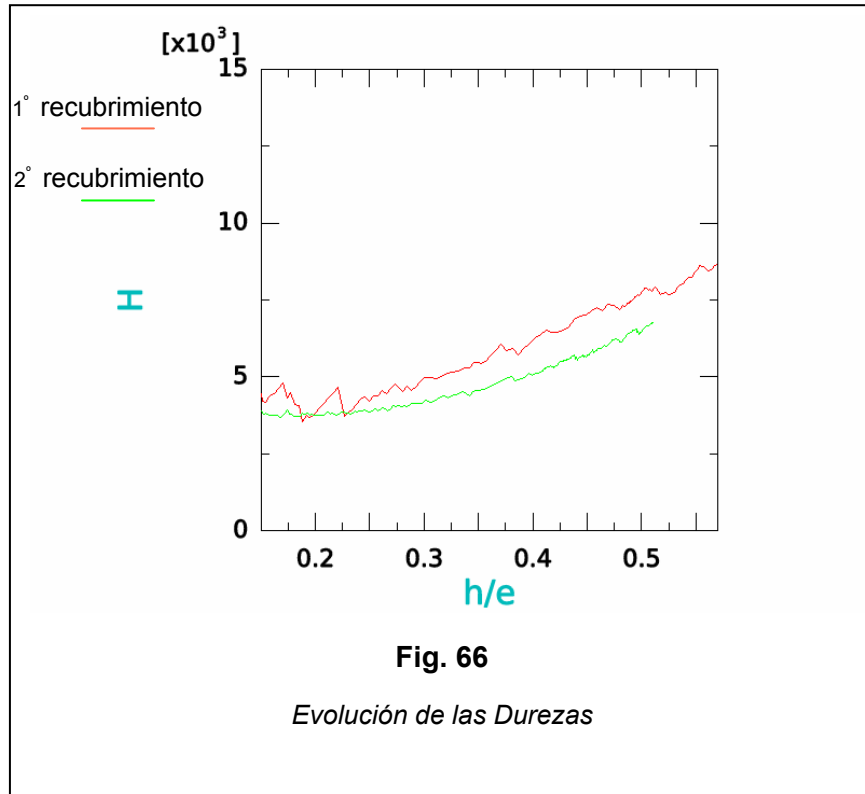
**Tabla 4**

*Parámetros de contacto para las simulaciones de indentación de tipo Berkovich con modelo de plasticidad cristalina*



### 8.3.2.1. Curvas de Dureza

La dureza del material  $H$  se obtiene dividiendo la fuerza aplicada por la superficie real de material desplazada  $A$  (véase parte 3).



Estas curvas son mucho menos nítidas que las curvas  $P-h$  porque ABAQUS no calcula  $H$  directamente. Tenemos que pedirle calcular la expresión de  $H$  que hemos visto  $E_c(2.1)$

Se constata que este parámetro,  $H$ , que es constante para un tipo de material dado, aumenta aquí con la profundidad de penetración. Este crecimiento de la dureza también se debe a la presencia del sustrato cuya oposición a la progresión del indentador se vuelve cada vez más grande a medida que la profundidad de penetración aumenta. Así la superficie real proyectada  $A$  aumenta menos rápidamente que la fuerza impuesta por el indentador.

Se observa que la dureza aumenta desde el principio de la prueba en el primer caso (recubrimiento más fino), pero que solo empieza, por el contrario, después de alrededor de un 25% del espesor del recubrimiento en el segundo caso, ya que durante esta primera parte el efecto del sustrato no actúa aún.

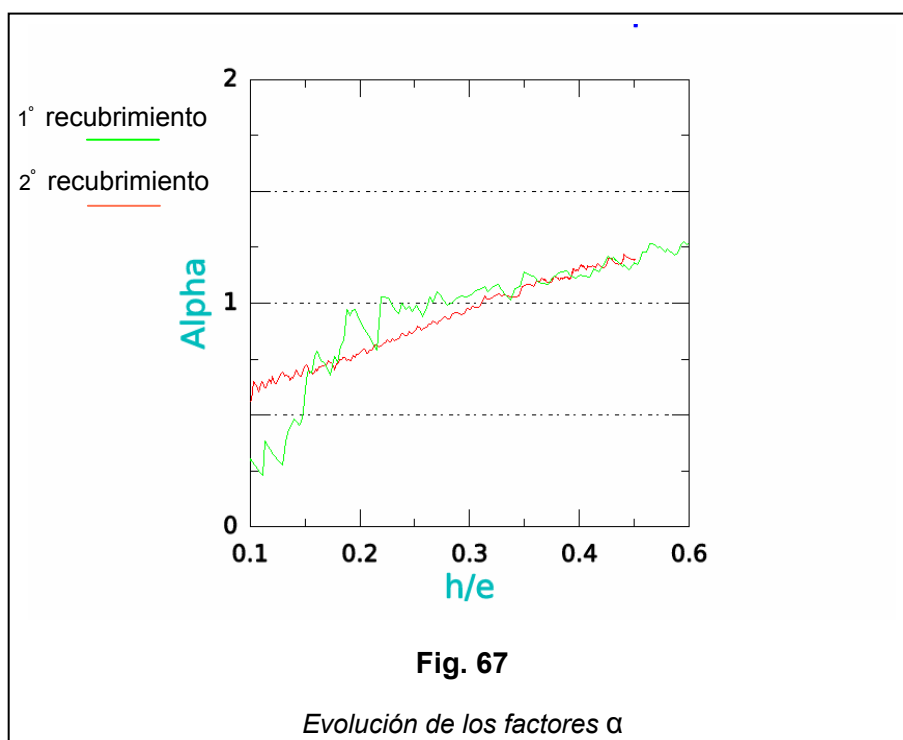
Esto muestra toda la importancia del grosor del recubrimiento con relación a la del sustrato en cuanto a la mejora de la dureza.



También podemos notar que la curva del primer recubrimiento tiene mucho más perturbación que la del segundo. Este significa que la evolución del área de material desplazada en el segundo caso es mas cercana de la realidad que la del primer.

### 8.3.2.2. Curvas del factor $\alpha$

El factor  $\alpha$  caracteriza el tipo de respuesta del material, a saber si apila ( $\alpha > 1$ ) o si hunde ( $\alpha < 1$ )

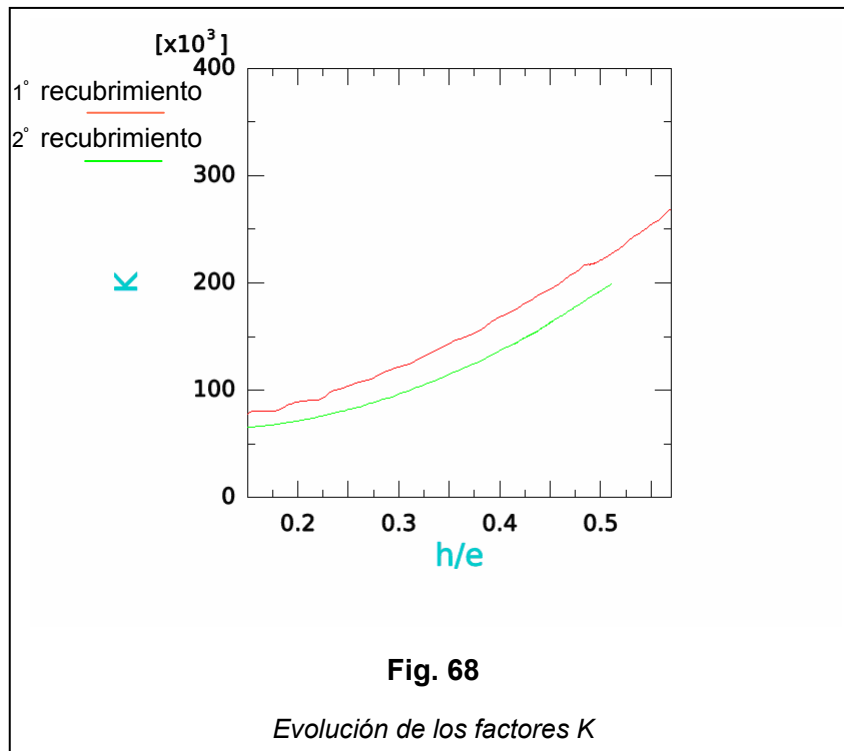


Aquí también observamos el aumento del factor  $\alpha$ , cuyo valor es constante en los ensayos de materiales homogéneos. El aumento del factor  $\alpha$  se ve sobre los dos casos, pero no podemos decir al final si el material realmente apilará sobre el indentador, como este grafico lo muestra ( $\alpha > 1$  después que la profundidad de penetración representa el 30% de espesor del recubrimiento) porque no sabemos que efecto tienen las deformaciones incoherentes (descritas en la Sección 8.2) en este resultado.

### 8.3.2.3. Curvas del factor K

Como lo hemos visto Ec (2.5) y (2.6) el factor K depende del factor  $\alpha$  y de la dureza H ( $K = f \alpha H$ ), así la evolución de este factor K nos da un evolución del producto de H por  $\alpha$ .





Este factor nos da una curva mucho más nítida que la de la dureza y la del factor  $\alpha$ , entonces es más fácil de dar una interpretación a los resultados estudiando este factor que los dos primeros( H y  $\alpha$ ).

Aquí igualmente, vemos la evolución de K que crece con la profundidad de penetración aunque K sea constante por un material homogéneo y pues, podemos ver muy bien que este crecimiento no es lineal, es decir que la velocidad de aumento del factor K no es constante y que sube también con la profundidad de penetración, Pero a partir de que  $h/e = 0.3$  en el primer caso y  $0.25$  en el segundo, las deformaciones incoherentes influyen sobre este resultado.



## 9. CONCLUSIONES

El estudio realizado suministra un conocimiento fundamental acerca de la micromecánica de los ensayos de micro y nano-indentación realizados en un recubrimiento monocristalino de carácter metálico sobre un sustrato monocristalino elástico. Este estudio muestra que la presencia del sustrato elástico debajo del recubrimiento, influye de manera importante la respuesta del recubrimiento al ensayo.

- 1) La forma de la zona plástica experimenta un cambio significativo debido a la presencia del sustrato elástico. Este efecto se puede caracterizar normalizando la profundidad de penetración con respecto al espesor del recubrimiento, de forma tal que cuanto más grueso el recubrimiento, la influencia del sustrato aparece a mayores profundidades de penetración. En cualquier caso, la respuesta al contacto del sustrato mantiene su dependencia con respecto a la orientación cristalográfica de forma similar a lo establecido mediante las simulaciones en monocristales. En este sentido, la zona plástica tiende a alargarse en la dirección de los sistemas de deslizamiento, de forma tal de apreciarse una clara anisotropía cuyas características esenciales siguen a las encontradas en la indentación de monocristales.
- 2) La presencia del sustrato aumenta la dureza medida en el recubrimiento. En la medida que la profundidad de penetración aumenta, también lo hace la dureza. El factor  $\alpha$  que mide el desarrollo de apilamiento o hundimiento, exhibe un cambio gradual durante la penetración. Este efecto se debe a la influencia del sustrato en la respuesta al contacto, ya que en las simulaciones realizadas en monocristales homogéneos,  $\alpha$  permanece constante debido a la similitud mecánica del problema. El parámetro  $\alpha$ , que es claramente inferior a la unidad en monocristales homogéneos debido a su tendencia a desarrollar hundimiento en la periferia del contacto, tiende gradualmente a crecer en los ensayos de recubrimientos. Este fenómeno es muy marcado, llegándose a detectar apilamiento de material a profundidades de penetración del orden de la mitad del espesor del recubrimiento.
- 3) La tendencia gradual del recubrimiento a disminuir el hundimiento que se desarrolla en la periferia del contacto en la medida que la indentación progresa se ve afectado por la naturaleza cristalina de éste. En este sentido, la presencia del sustrato impide el desarrollo de deformación plástica en la dirección del espesor, facilitando el flujo radial. Este flujo radial es suficientemente significativo como para inducir apilamiento alrededor del área de contacto.



## 10. BIBLIOGRAFÍA

- [1] TEODOSIU (C.). - *A physicval theory of the finite elastic-viscoplastic behaviour of single crystals*. Eng. Trans., 23, p.157-183 (1975).
- [2] TEODOSIU (C.) y SIDOROFF (F.). - *A finite theory of the elastoviscoplasticity of single crystals*. International Journal of Engineering Science, 14, p. 713-723 (1976).
- [3] RAUCH (E.). - *Etude de l'écrouissage des métaux: Aspects microstructuraux et lois de comportement*. Thèse d'habilitation, Institut National Polytechnique de Grenoble(1993).
- [4] MECKING (H.) y KOCKS(U.F.). - *Kinematics of flow and strain hardening*. Acta Metallurgica. 29, p. 1865-1875 (1981)
- [5] MECKING (H.) y LUCKE (K.). - *A new aspect of the theory of flow stress in metals*. Scripta Metallurgica, 4 (6), p. 427-432 (1970)
- [6] ESSMANN (U.) y MUGHRABI (H.) - *Annihilation of dislocations during tensile and cyclic deformation and limits of dislocation densities*. Philosophical Magazine A, 40 (6), p. 731-756 (1967).
- [7] MECKING (H.). - *Analyse der thermish aktivierten Versetzungsbewegung in verfestigen kubish flachenzentrierten Metallen*. Tesis eficiencia investigadora, Rheinisch-Westfalischen Technischen Hochschule, Aachen(Alemania) (1973).
- [8] ASARO (R.J.), PIERCE (U.) y NEEDLEMAN (A.). - *Material rate dependence and localized deformation in crystalline solids(overview n°32)*. Acta Metallurgica, 31 (12), p. 1951-1976 (1983).
- [9] COTTRELL (A.H.) y STOCKES (R.J.). - *Effects of temperature on the plastic properties of aluminium crystals*. Proceeding of the Royal Society of London A, 233, p. 17-34 (1955).
- [10] NEUHÄUSER (H.), HIMSTEDT (N.) y SCHWINK (Ch.). - *Macroscopic and microscopic studies of the plastic behaviour of copper single crystals during strain-rate changes – i.activation volume and active dislocation length*. Phys. Stat. Sol. (a), 3, p.585-598 (1970).
- [11] NEUHÄUSER (H.) y SCHWINK (Ch.). - *On the flow stress of [100]- and [111] oriented Cu-Mn single crystals: a transmission electron microscopy study*. Phil. Mag. A, 65 (6), p. 1463-1484 (1982).





[12] BASINSKI (S.J.) y BASINSKI(Z.S.). - *Plastic deformation and work hardening. Vol.4 of Dislocation in Solids.* (F.R.N.) Nabarro (éd.), Amsterdam: North Holland [261] (1979).

[13] FRANCIOSI (P.). - *Etude théorique et expérimentale du comportement élastoplastique des monocristaux métalliques se déformant par glissement: modélisation pour un chargement complexe quasi statique.* Tesis doctoral, Université Paris-Nord(1984).

[14] BELL (J.F.). - *A generalized large deformation behaviour for face-centered cubic solids-high purity copper.* Phil. Mag., 10 (103), p. 107-126 (1964).

[15] BELL (J.F.) y GREEN Jr (R.E.). - *An experimental study of the double slip deformation hypothesis for face centered cubic single crystals.* Phil. Mag., 15 (135), p. 469-476 (1967)

[16] FIVEL (M.). - *Etudes numériques à différentes échelles de la déformation plastique des monocristaux de structure cfc.* Tesis doctoral, Institut National Polytechnique de Grenoble (1997).

[17] TABOUROT (L.), FIVEL (M.), RAUCH(E.) y CANOVA (G.). - *Identification through mesoscopic simulations of macroscopic parameters of physically based constitutive equations for the plastic behaviour of fcc single crystals.* Journal de Physique IV (1998).



## 11. BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

- ABAQUS - Inc.: *ABAQUS 6.4 User's Manual*. Providence, Rhode Island, USA (2004)
- ASARO y RICE – *Strain localization in ductile single crystals*. J. Mech. Phys. Solids, p. 25-309 (1977)
- BASSANI y WU - *Latent Hardening in Single Crystals II*. Analytical Characterization and Predictions, Proc. R. Soc. Lond. A 435, 21. (1991),
- Y. Huang - *Internal Report*. Harvard University, Cambridge, MA, Vol. MECH-178, p. 1–46.(1991)

